

OPERACIONES BÁSICAS DE INGENIERÍA QUÍMICA

Trabajo 1 (primera parte)

Curso 01/02

CÁLCULO DE OPERACIONES DE SEPARACIÓN MULTICOMPONENTE

El objetivo de este trabajo es desarrollar los métodos de cálculo para las operaciones de separación multicomponente en régimen estacionario de un proceso continuo con equipos de separación por transferencia de materia. Como todas están relacionadas es necesario resolver conjuntamente las ecuaciones de cada elemento. 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 hidrodeshalquilación 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 de destilación.

Las funciones de cálculo (desarrolladas con matlab en el entorno SIMOBIQ) 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 un grupo de personas de forma individual de acuerdo con las indicaciones que se dan más adelante. Estas funciones serán ofertadas en las actualizaciones de SIMOBIQ en la página de red de la asignatura para su uso por los demás.

Eligiendo entre las funciones presentadas, en la segunda parte, de forma individual se construirá el proceso y los métodos de convergencia de forma que se resuelvan los balances de materia y energía. 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) deberían 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. *La forma de estas funciones y las siguientes debe ser exactamente la indicada.*

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 estructuras que representan las corrientes con el siguiente patrón:

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

siendo la composición a su vez un vector con las fracciones molares de los componentes según el vector *comp*.

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:

$$[DL, DV, B, QH, QC, PER] = colfrac(F, N, nf, P, P1, P2, ..)$$

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 $P1, P2, \dots$ 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.

$$[Dt, PLA] = dimcol(PER, P1, P2, ..)$$

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. $P1, P2, \dots$ son los parámetros de diseño que se definan.

Las funciones así como su documentación se ubicarán en la página de red de los trabajos. Para ello se enviarán por correo electrónico a sgalan@diquima.upm.es los ficheros .m con las funciones y la documentación en formato pdf antes de la fecha límite indicada.

La documentación debe proporcionar la siguiente información:

1. ¿Qué hace la función?
2. ¿Cómo lo hace?
3. ¿Cómo se usa?:
 - Presentando dos ejemplos que sirvan para que otras personas la apliquen y para comprobar que su funcionamiento es correcto
 - Indicando las limitaciones si las hubiera

La nota del trabajo se pondrá con los siguientes criterios:

1. Obtención de resultados correctos: 6 puntos

Como no se podrá hacer un análisis detallado de las funciones la evaluación se basará en los ejemplos presentados, las pruebas aleatorias que se puedan hacer y la impresión obtenida del código de las funciones, para lo que es un elemento importante su documentación con comentarios y la claridad de la estructura.

2. Documentación: 4 puntos.

Aquí se evaluará la comprensión por el estudiante de los métodos aplicados, deducida de la corrección y claridad de la exposición.

3. Más de tres faltas de ortografía limitarán la máxima nota a 8 puntos. La no adecuación al formato pedido reducirá adicionalmente la nota máxima en otro 20 %.

Hay que resaltar que sólo la cooperación entre todos permitirá que el conjunto final funcione correctamente.