

# OPTIMIZACIÓN DINÁMICA DE INTERCAMBIADORES DE CALOR CRIOGÉNICOS CON Y SIN CAMBIO DE FASE

Juan I. Laiglecia, P.Hoch y M. Soledad Diaz†

†Planta Piloto de Ingeniería Química (Universidad Nacional del Sur - CONICET), Camino La Carrindanga Km 7, 8000 Bahía Blanca, Argentina, sdiaz@plapiqui.edu.ar

Resumen: En este trabajo se formulan modelos dinámicos para intercambiadores de calor de carcasa y tubo, contracorriente, con y sin cambio de fase con un enfoque orientado a ecuaciones. El problema resultante de la formulación de los balances de energía dinámicos en el intercambiador en contra-corriente, es transformado en un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (ODE) mediante la aplicación del método de líneas (Schiesser, 1991). Las ecuaciones algebraicas del modelo están conformadas por la ecuación de estado de Soave-Redlich-Kwong (SRK) para la predicción de las propiedades termodinámicas, ecuaciones hidráulicas y de diseño. El problema se ha implementado en un ambiente de AMPL. En este entorno, el problema de optimización dinámica se discretiza en el tiempo por colocación ortogonal sobre elementos finitos, transformándolo en un problema no lineal a gran escala, que se resuelve en IPOPT mediante un método de punto interior que emplea técnicas de Programación Cuadrática Sucesiva en espacio reducido.

Palabras claves: *Optimización Dinámica, Intercambiadores de Calor Criogénicos, Condensación Parcial*

## 1. INTRODUCCIÓN

El análisis dinámico de intercambiadores provee información sobre las respuestas transitorias sujetas a diversos tipos de perturbaciones. Con respecto a la complejidad, los modelos dinámicos de intercambiadores pueden ser de parámetros concentrados o distribuidos. En el primer caso, se consideran las temperaturas de los fluidos como funciones del tiempo. En el caso de modelos a parámetros distribuidos, se consideran variaciones de las variables de estado no solo en el tiempo, sino también en el espacio. En ambos casos, el modelo resultante es un sistema de ecuaciones diferencial-algebraico que representa las ecuaciones de continuidad y balances de momento y energía.

Correa y Marchetti (1987) desarrollan un modelo de simulación dinámica multi-celda, que describe el comportamiento de intercambiadores de calor multipaso con deflectores en los estados transitorios. Zinemanas et al. (1984) proponen un algoritmo para la simulación de intercambiadores horizontales o verticales de carcasa y tubos con cambio de fase y uno o más componentes.

En este trabajo se formulan modelos dinámicos para intercambiadores de calor de carcasa y tubo, contracorriente, con y sin cambio de fase con un enfoque orientado a ecuaciones. En el modelo se formularon los balances dinámicos de energía y masa, correlaciones hidráulicas y predicciones termodinámicas rigurosas mediante la ecuación de estado SRK para el cálculo del equilibrio. Los balances de energía en los intercambiadores de calor nos generan un problema de parámetros distribuidos el cual es transformado en un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias mediante la discretización espacial aplicando el método de líneas. Este problema de optimización dinámica, el cual incluye ecuaciones tanto diferenciales como algebraicas (DAE), ha sido resuelto mediante el enfoque simultáneo. Donde este enfoque, propone discretizar el sistema DAE mediante puntos de colocación sobre elementos finitos resultando en un problema no lineal a gran escala. La solución del problema provee los perfiles de variables de control y estado en espacio y tiempo, así como también la condensación parcial en el intercambiador de calor.

## 2. MODELADO MATEMÁTICO

### 2.1. INTERCAMBIADOR DE CALOR CRIOGÉNICO SIN CAMBIO DE FASE

Se han formulado los balances de energía en elementos diferenciales de volumen del lado de la carcasa y de los tubos. Estos balances dan lugar a un sistema de ecuaciones diferenciales a derivadas parciales (PDE) hiperbólico de primer orden.

Balance en los tubos:

$$\frac{\partial T_t(z,t)}{\partial t} + v_t \frac{\partial T_t(z,t)}{\partial z} = \frac{h_t * A_{sup}}{\rho_t * C_{p_t} * A_t * L} (T_s(z,t) - T_t(z,t))$$

Balance en la carcasa:

$$\frac{\partial T_s(z,t)}{\partial t} - v_s \frac{\partial T_s(z,t)}{\partial z} = \frac{h_s * A_{sup}}{\rho_s * C_{p_s} * A_s * L} (T_t(z,t) - T_s(z,t))$$

El PDE se ha transformado en un sistema ODE mediante la aplicación del Método de Líneas. El modelo incluye las ecuaciones algebraicas que incorporan la dependencia de la densidad, el factor de compresibilidad y velocidad, respecto de la temperatura para cada celda del intercambiador.

$$\rho_{j,i} = \frac{MW * P}{z_{j,i} * R * T_{j,i}} ; \quad v_{j,i} = \frac{F_j}{\rho_{j,i} * A_j} ; \quad z_{j,i} = a_j + b_j * T_{j,i}$$

$i = 1, \dots$ , número de celdas;  $j =$  tubo (t), carcasa (s)

## 2.2 INTERCAMBIADOR DE CALOR CRIOGÉNICO CON CAMBIO DE FASE

El modelo de un intercambiador con cambio de fase consta de dos partes: un submodelo de flujo bifásico y otro de flujo monofásico. Se formulan balances de masa para la fase líquida y la fase vapor, balances de energía y de cantidad de movimiento. A continuación, se presentan los balances ya discretizados espacialmente:

Balance de masa fase vapor

$$\frac{dM_{V,i}}{dt} = V_{i-1} - V_i + m_{LV,i}$$

donde  $m_{LV,i}$  corresponde al transporte de masa interfacial del líquido a la fase vapor en la celda  $i$ .

Balance de masa fase líquida

$$\frac{dM_{L,i}}{dt} = L_{i-1} - L_i - m_{LV,i}$$

Como ambas fases se encuentran en equilibrio termodinámico en cada instante de tiempo, se requiere sólo un balance de energía para el sistema líquido-vapor, en el que  $E$  se refiere a la energía interna.

$$\frac{dE_i}{dt} = L_{i-1} * h_{i-1} + V_{i-1} * H_{i-1} - L_i * h_i - V_i * H_i + Q_i^t$$

El perfil de presión a lo largo del intercambiador de calor ha sido calculado en cada celda asumiendo estado estacionario mediante el método de Bell-Delaware.

Las siguientes ecuaciones algebraicas completan el modelo y el cálculo del equilibrio líquido-vapor.

Energía interna:

$$E_i = M_{V,i} H_i + M_{L,i} h_i$$

Relación de equilibrio para el componente  $j$  ( $K_{i,j}$ ):

$$K_{i,j} = \frac{\phi_{i,j}^L}{\phi_{i,j}^V}$$

$$y_{i,j} = K_{i,j} x_{i,j}$$

Ecuaciones de suma de fracciones molares:

$$\sum_j y_{i,j} - \sum_j x_{i,j} = 0$$

Entalpía de vapor ( $H_i$ ) y de líquido ( $h_i$ ):

$$H_i = H_i^{ideal} - \Delta H_i$$

$$H_i^{ideal} = \sum_{j=1}^{nc} H_{i,j}^{ideal}(T_i) y_{i,j}$$

$$h_i = h_i^{ideal} - \Delta h_i$$

$$h_i^{ideal} = \sum_{j=1}^{nc} h_{i,j}^{ideal}(T_i) x_{i,j}$$

donde  $\Delta H_i$  y  $\Delta h_i$  son entalpías residuales, que se calculan con la ecuación de estado SRK (Soave, 1970).

Para evitar el cruce de temperatura, se incluyeron restricciones adicionales en el problema de optimización.

El planteo del modelo dentro de un enfoque simultáneo de simulación y optimización dinámica permite el manejo directo de estas restricciones de camino a lo largo del horizonte de tiempo.

### 3. CASO DE ESTUDIO

Como se observa en la Figura 1, el fluido frío circula por los tubos de los intercambiadores e ingresa al primer intercambiador criogénico HE1, donde intercambia calor con el gas de alimentación que condensa parcialmente. En el segundo intercambiador HE2, el gas natural circulante por la carcasa, se enfría en contracorriente con el gas residual que sale del HE1. La válvula a la salida del primer intercambiador de calor permite re direccionar parte del gas residual sin intercambiar calor en HE2. De esta forma se controla la temperatura de salida del gas natural.

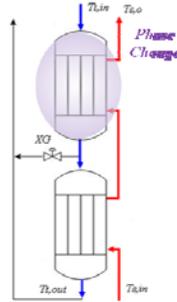


Figura 1. Configuración de los intercambiadores de calor

### 4. OPTIMIZACIÓN DINÁMICA DEL SISTEMA DE INTERCAMBIADORES CRIOGÉNICOS

El objetivo es minimizar el transitorio para lograr un cambio de condición operativa de la temperatura de salida del gas parcialmente condensado de los intercambiadores criogénicos ( $T_S$ ) a un valor deseado ( $T_{SP}$ ). El problema de optimización dinámica queda formulado de la siguiente manera:

$$\min \int_0^{t_f} (T_S - T_{SP})^2 dt$$

st.

{Modelo DAE Intercambiadores }

$$0 \leq x_{bypass} \leq 1.$$

$$T_{S_k} - T_{t_{k+1}} \geq \Delta T_{min}; k = 1, \dots, N_{cells1} - 1$$

$$T_{S_k} - T_{t_{IN1}} \geq \Delta T_{min}; k = N_{cells1}$$

$$T_{S_j} - T_{t_{j+1}} \geq \Delta T_{min}; j = 1, \dots, N_{cells2} - 1$$

$$T_{S_j} - T_{t_{IN}} \geq \Delta T_{min}; j = N_{cells2}$$

$$T_{S_{m,IN}} \geq T_{S_{m,1}}; m = 1, 2$$

$$T_{S_{m,i}} \geq T_{S_{m,i+1}}; i = 1, \dots, N_{cellsm} - 1; m = 1, 2$$

$$T_{t_{m,i}} \geq T_{t_{m,i+1}}; i = 1, \dots, N_{cellsm} - 1; m = 1, 2$$

$$T_{t_{m,N_{cellsm}}} \geq T_{t_{m,IN}}; m = 1, 2$$

$$z(t=0) = z_0; y_L \leq y \leq y_U; z_L \leq z \leq z_U$$

donde se imponen restricciones para impedir el cruce de temperaturas en cada celda del intercambiador 1 y 2 ( $N_{cells1}$  y  $N_{cells2}$ ), respectivamente. También se imponen restricciones adicionales para asegurar la monotonicidad en las temperaturas de las celdas. La función objetivo integral se ha tratado como una ecuación diferencial adicional:

$$\frac{dz_1}{dt} = (T_S - T_{SP})^2$$

$$z_1(0) = 0$$

El problema se ha implementado en un ambiente de AMPL, integrado al programa IPOPT (Cervantes et al., 2000; Biegler et al., 2002). Las derivadas parciales primeras y sus expresiones analíticas se incluyen en el código AMPL. Con una discretización del horizonte de tiempo con 8 elementos finitos y dos puntos de colocación, se obtiene un problema NLP con 15630 variables algebraicas. El problema se resolvió en 50 iteraciones, partiendo de un valor inicial del parámetro de barrera de 0.01, con un tiempo de cómputo de 700 s. Los resultados obtenidos se muestran en las siguientes figuras.

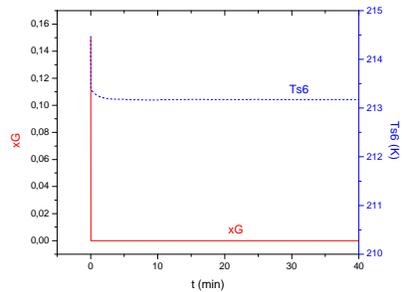


Figura 2. Perfil óptimo de la fracción bypass y temperatura de salida de la carcasa del HE1.

La Figura 2 muestra que se requiere un cierre total instantáneo de la válvula del bypass (de 15% a 0%), produciendo una respuesta de primer orden en la temperatura de salida del segundo intercambiador, alcanzándose el estado estacionario luego de los 35 minutos.

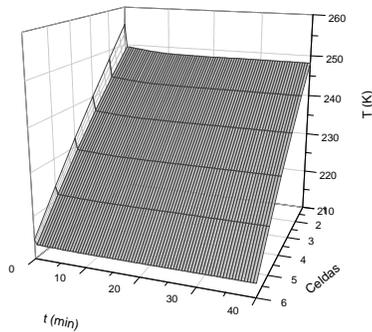


Figura 3. Perfiles temporales y espaciales de temperatura del fluido que condensa en la carcasa

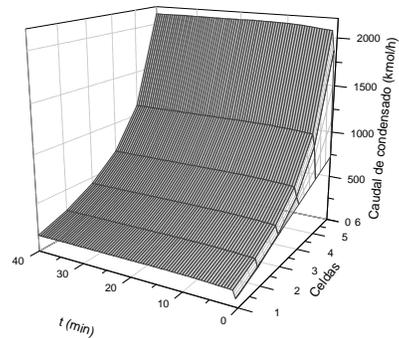


Figura 4. Perfil espacial y temporal del caudal de condensado en HE2.

#### REFERENCIAS

- [1] K. J. BELL-DELAWARE METHOD FOR SHELL SIDE DESIGN, PETRO/CHEM ENG. 1 (1960) PP. 26-40
- [2] L. T. BIEGLER, A. CERVANTES, A. WATCHER, *Advances in simultaneous strategies for dynamic process optimization*, Chem. Eng. Sci., 57, 575-593, 2002.
- [3] L. T. BIEGLER, A. CERVANTES, *Large-scale DAE optimization using simultaneous nonlinear programming formulations*, AIChE J., 44, 1038-1050, 1998.
- [4] D. CORREA, J. MARCHETTI, *Dynamic simulation of shell-and-tube heat exchangers*, Heat Transfer Eng., 8, 50-59, 1987.
- [5] A. RAGHUNATHAN, M. S. DÍAZ, L. T. BIEGLER, *An MPEC formulation for dynamic optimization of distillation operations*, Comput. Chem. Eng., 28, 421-434, 1994.
- [6] D. ZINEMANAS, D. HASSON, E. KEHAT, *Simulation of heat exchangers with change of phase*, Comput. Chem. Eng., 8, 367-375, 1984.