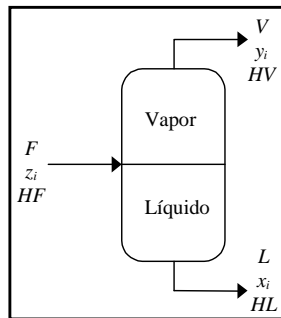


**Problema 1:**

Diagramar un algoritmo para el cálculo de la presión de burbuja de una mezcla de composición y temperatura dadas.

*Respuesta:*



Trabajado algebraicamente el sistema de ecuaciones para un flash isotérmico se llega a la siguiente ecuación:

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

donde  $K_i$  es la constante de equilibrio para cada componente  $i$ ,  $z_i$  la composición de la alimentación y  $\theta$  (fracción vaporizada) como la relación del caudal de vapor producido al caudal de alimentación.

Si se aplica la definición de presión de burbuja y se analiza la ecuación anterior, vemos que dada la temperatura, encontrar la presión a la cual aparece la primera burbuja de vapor, equivale conceptualmente a encontrar  $P$  que cumpla con:

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

Resolviendo el límite se tiene  $\sum_{i=1}^{NC} z_i - \sum_{i=1}^{NC} z_i K_i = 0$ , de donde debe satisfacerse:

$$\sum_{i=1}^{NC} z_i K_i = 1$$

*Hipótesis:*

- La composición de la mezcla de alimentación es conocida.
- La temperatura del equipo es conocida y constante.
- La composición de la mezcla líquida  $x_i \cong z_i$ .

*Algoritmo:*

1. Estimar  $P$  inicial ( $P_0$ ) y composición del vapor inicial ( $y_0$ ).
2. Calcular  $K_i = K_i(T, P, x_i, y_i)$ .
3. Calcular  $y_i = K_i x_i$ .
4. Comparar los valores obtenidos de  $y_i$  en el paso 3 con los del paso 1. Si no satisface el criterio de tolerancia (es decir si la diferencia entre las normas de los vectores de composición consecutivos es mayor que el error especificado), volver al paso 2 proponiendo el mismo conjunto  $y_i$  recientemente calculado (sustitución directa) o bien utilizar métodos de aceleración de convergencia (Wegstein). Si satisface el error continuar con el paso 5.
5. Evaluar  $\sum_{i=1}^{NC} z_i K_i = 1$ . Si no satisface el error especificado, volver al paso 2 proponiendo un nuevo valor de  $P$  (Newton-Raphson, Muller). Si satisface el criterio de tolerancia continuar con el paso 6.
6. Mostrar el valor de  $P$  hallado.
7. Parar.

Para mezclas ideales se anula el lazo de composiciones ya que  $K_i = (P, T)$ .

### **Problema 2:**

Diagramar un algoritmo para el cálculo de la presión de rocío de una mezcla de composición y temperatura dadas.

*Respuesta:*

Idem al anterior pero ahora se debe encontrar la  $P$  (fijada la temperatura) a la cual aparece la primera gota de condensado. La condición debe cumplirse cuando la fracción líquida tiende a cero (o bien la fracción vaporizada tiende a uno), es decir:

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

Resolviendo el límite, y operando algebraicamente, se obtiene la siguiente expresión:

$$\boxed{\sum_{i=1}^{NC} \frac{z_i}{K_i} = 1}$$

*Hipótesis:*

- La composición de la mezcla de alimentación es conocida.
- La temperatura del equipo es conocida y constante.
- La composición de la mezcla vapor  $y_i \cong z_i$ .

*Algoritmo:*

1. Estimar  $P$  inicial ( $P_0$ ) y composición del líquido inicial ( $x_0$ ).
2. Calcular  $K_i = K_i(T, P, x_i, y_i)$ .
3. Calcular  $x_i = z_i / K_i$ .
4. Comparar los valores obtenidos de  $x_i$  en el paso 3 con los del paso 1. Si no satisface el criterio de tolerancia, volver al paso 2 proponiendo el mismo conjunto  $x_i$  recientemente calculado (sustitución directa) o bien utilizar métodos de aceleración de convergencia (Wegstein). Si satisface el error continuar con el paso 5.
5. Evaluar  $\sum_{i=1}^{NC} \frac{z_i}{K_i} = 1$ . Si no satisface el error especificado, volver al paso 2 proponiendo un nuevo valor de  $P$  (Newton-Raphson, Muller). Si satisface el criterio de tolerancia continuar con el paso 6.
6. Mostrar el valor de  $P$  hallado.
7. Parar.

Para mezclas ideales se anula el lazo de composiciones ya que  $K_i = (P, T)$ .

### **Problema 3:**

Conocida la mezcla de composición  $x_i$  y las condiciones de presión y temperatura, diagramar un algoritmo para establecer la fase de dicha mezcla.

*Hipótesis:*

- Flash isotérmico.
- La alimentación entra a las mismas condiciones de  $P$  y  $T$  que hay en el equipo flash.
- La composición de la alimentación  $z_i$ .
- $K_i = K_i(P, T, x_i, y_i)$ .

*Algoritmo:*

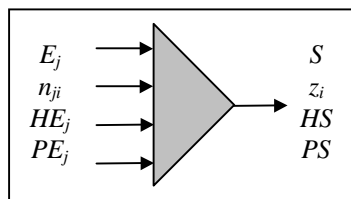
1. Ingresar los valores de  $P$ ,  $T$  y  $x_i$ .
2. Ingresar un valor inicial del vector  $y_i$  y de  $\theta$ .
3. Calcular  $K_i = K_i(P, T, x_i, y_i)$ .
4. Calcular  $y_i = K_i x_i$ .
5. Verificar si los valores obtenidos para  $y_i$  en el paso 4 satisfacen el error, es decir, si  $y_{i+1} - y_i \cong 0$ . De lo contrario, proponer por medio de algún método numérico (Sustitución Directa, Wegstein), un nuevo valor para el vector  $y_i$ , retornando al paso 3.
6. Evaluar  $\sum_{i=1}^{NC} \frac{(K_i - 1)x_i}{\theta (K_i - 1) + 1} = 0$ . Si la misma no cumple con el error especificado, proponer un nuevo valor para  $\theta$  (Sustitución Directa, Newton-Raphson) y volver al paso 6. Caso contrario, continuar con el paso 7.
7. Comparar el valor de  $\theta$ :
  - Si  $\theta = 0$ , la mezcla se encuentra en fase líquida.
  - Si  $\theta = 1$ , la mezcla se encuentra en fase gaseosa.
  - Si  $0 < \theta < 1$ , la fase es una mezcla líquido-vapor.
8. Mostrar el valor de  $\theta$  e indicar la fase en la que se encuentra la mezcla.
9. Parar.

**Problema 4:**

Suponer que se desea confeccionar un módulo que represente un nodo sumador. Esto es ingresan  $n$  corrientes y sale una sola con las propiedades correspondientes a la suma de las mismas. Confeccionar un diagrama de flujo para un programa computacional del módulo de referencia.

*Hipótesis:*

- Constante de equilibrio:  $K_i = K_i(P, T)$ .
- Entalpía molar:  $H_i = H_i(P, T, \text{composición})$ .
- Disponibilidad de subrutinas para el cálculo de propiedades fisicoquímicas y métodos de iteración.
- Caída de presión a través del equipo ( $\Delta P$ ): conocida y constante.
- No hay reacciones químicas.
- Se adopta a la presión de salida ( $PS$ ), constante e igual a la menor de las diferencias  $PE_j - \Delta P$  o se puede especificar.



$$\text{Con } \begin{cases} i = 1, 2, \dots, NC \text{ componentes} \\ j = 1, 2, \dots, N \text{ corrientes} \end{cases}$$

Siendo:  $E_j$  los caudales,  $n_{ji}$  la composición,  $HE_j$  la entalpía y  $PE_j$  la presión de las corrientes de entrada;  $S$  el caudal,  $z_i$  la composición,  $HS$  la entalpía y  $PS$  la presión (dato o supuesto) de la corriente de salida.

Balace de materia global: 
$$\sum_{j=1}^N E_j - S = 0 \tag{1}$$

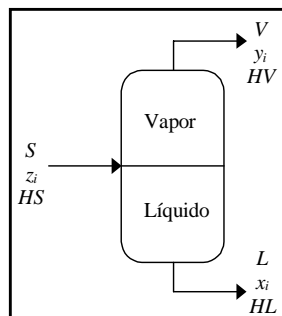
Balace por componentes: 
$$\sum_{j=1}^N (E_j n_{ij}) - S z_i = 0 \tag{2}$$

Balace de energía: 
$$\sum_{j=1}^N (E_j HE_j) - S HS = 0 \tag{3}$$

Balace de presiones 
$$PE_j + \Delta P - PS = 0 \tag{4}$$

Donde  $PE_j$  es la menor de todas las presiones de las corrientes de entrada y  $\Delta P$  es negativo.

Por medio de la Ec. (1) se puede calcular  $S$ , luego por la Ec. (2)  $z_i$ , por la Ec. (3)  $HS$  y con la Ec. (4)  $PS$ . Conocido  $S$ ,  $z_i$ ,  $HS$ ,  $PS$  y suponiendo flash adiabático ( $Q = 0$ ), se calcula  $T$  y  $\theta$  (fracción vaporizada).



Donde:

- $V$ ,  $y_i$  y  $HV$  son el caudal, la composición y la entalpía de la fase vapor respectivamente.
- $L$ ,  $x_i$  y  $HL$  son el caudal, la composición y la entalpía de la fase gaseosa.

$$\text{Balance de materia global:} \quad S - V - L = 0 \quad (5)$$

$$\text{Balance por componentes:} \quad S z_i - V y_i - L x_i = 0 \quad (6)$$

$$\text{Balance de energía:} \quad S HS - V HV - L HL = 0 \quad (7)$$

Definiendo a la fracción vaporizada como la relación  $\theta = \frac{V}{S}$  y recordando que  $y_i = K_i x_i$  y que

$\sum_{i=1}^{NC} y_i - \sum_{i=1}^{NC} x_i = 0$ , se puede llegar a las siguientes ecuaciones:

$$x_i = \frac{z_i}{\theta(K_i - 1) + 1} \quad (8)$$

$$y_i = \frac{z_i K_i}{\theta(K_i - 1) + 1} \quad (9)$$

$$\sum_{i=1}^{NC} \frac{z_i (K_i - 1)}{\theta(K_i - 1) + 1} = 0 \quad (10)$$

$$1 - \theta \frac{HV}{HS} - (1 - \theta) \frac{HL}{HS} = 0 \quad (11)$$

*Esquemáticamente los pasos a seguir en este caso son los siguientes:*

1. Estimar los valores iniciales de  $x_i$  e  $y_i$ .
2. Estimar un valor inicial de la temperatura ( $T$ ) y de la fracción vaporizada ( $\theta$ ).
3. Calcular el valor de las funciones de discrepancia con respecto al error permitido para las Ecs. (10) y (11). Si se satisface el criterio de error ir al paso 7. De lo contrario, seguir con el paso 4.
4. Generar la matriz Jacobiana evaluando las derivadas parciales de ambas funciones respecto de ambas variables (matriz  $2 \times 2$ ).
5. Calcular, resolviendo el sistema correspondiente, los incrementos para la temperatura y la fracción vaporizada, a los efectos de obtener los nuevos valores para ambas variables de iteración.
6. Calcular el nuevo valor de las variables independientes ( $T$  y  $\theta$ ), y retornar al paso 2.
7. Calcular, a partir de  $T$  y  $\theta$ , el valor de las composiciones  $x_i$  e  $y_i$ , utilizando las Ecs. (8) y (9).
8. Comparar los valores obtenidos para  $x_i$  e  $y_i$  con los utilizados (supuestos) en la iteración anterior. Si coinciden continuar con el paso 9. De lo contrario, volver a 1. Usar los valores recientemente calculados de  $x_i$  e  $y_i$  para la nueva iteración (Sustitución Directa) o bien utilizar métodos acelerados (Wegstein).
9. Según el valor de  $\theta$  indicar que fase se halla presente ( $\theta = 0 \rightarrow$  fase líquida,  $\theta = 1 \rightarrow$  fase vapor,  $0 < \theta < 1 \rightarrow$  fase líquida-vapor).
10. Con el valor de  $\theta$ ,  $x_i$  e  $y_i$ , obtener los caudales de vapor ( $V$ ) y líquido ( $L$ ).

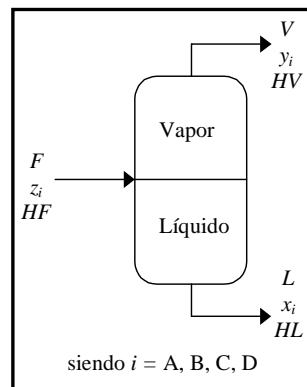
Esta estrategia de resolución puede ser modificada. En lugar de utilizarse un solo nivel de iteración para resolver las Ecs. (10) y (11), pueden emplearse dos niveles anidados de iteración: uno para la temperatura y otro para la fracción vaporizada. También se pueden agregar condiciones de detención por si el método supera un determinado número de iteraciones, mostrando un cartel que aconseje tomar mejores valores de inicialización.

**Problema 5:**

¿Cómo plantearía un módulo de evaporación flash adiabático en el cual existe la posibilidad de reacciones químicas en la fase líquida? ¿Qué datos adicionales necesita? ¿Cómo se modifica el balance de materia y energía? ¿Puede utilizarse la misma estrategia indicada para el caso en que no existe reacciones químicas?

*Hipótesis:*

- La alimentación está compuesta por 4 componentes: A, B, C, D.
- En la fase líquida se presenta la siguiente reacción química no reversible:  $A + B \rightarrow C + D$ ; cuya velocidad de reacción queda expresada por:  $r = k x_A x_B \rho$ .
- Reacción exotérmica.
- Reactor isotérmico.
- Volumen líquido en el flash: conocido y constante.



Balance de materia:  $F = V + L$

Balance por componentes:  $F z_i = V y_i + L x_i + (\xi) r \text{ Vol}$

Balance de energía:  $F HF = V HV + L HL - r \text{ Vol } \Delta Hr + Q$

Siendo:

- $F, L$  y  $V$  las corrientes de alimentación, de salida líquida y de salida vapor, respectivamente.
- $z_i, x_i$  e  $y_i$  la composición de las corrientes  $F, L$  y  $V$ , respectivamente.
- $HF, HL$  y  $HV$  la entalpía de las corrientes  $F, L$  y  $V$ , respectivamente.
- $r = k x_A x_B \rho$ , donde  $k$  es la constante cinética y  $\rho$  la densidad de la mezcla líquida en el interior del equipo.
- $\xi = 1$  para los componentes A, B y  $\xi = -1$  para C, D.
- $\text{Vol}$ : es el volumen líquido retenido en el evaporador flash.
- $\Delta Hr$ : es el calor de reacción.
- $Q$ : es el calor liberado por las paredes del evaporador flash.

Trabajando el balance por componentes y con ayuda de las relaciones:

- $y_i = K_i x_i$  ( $K_i(T, P, x_i, y_i)$ : constante de equilibrio líquido-vapor),
- $\theta = L/V$  (fracción vaporizada),
- $\tau = \text{Vol}/F$  (tiempo de residencia),

se pueden obtener las expresiones de  $x_i$  e  $y_i$ :

$$\frac{F z_i}{F} = \frac{L x_i}{F} + \frac{V y_i}{F} + \frac{(\xi) r \text{ Vol}}{F} \quad \Rightarrow \quad z_i = (1 - \theta)x_i + \theta K_i x_i + (\xi) r \tau \quad \Rightarrow$$

$$\Rightarrow z_i = x_i \{ \theta (K_i - 1) + 1 + (\xi) r \tau \} \Rightarrow$$

$$x_i = \frac{z_i}{\{ \theta (K_i - 1) + 1 + (\xi) r \tau \}} \quad \text{e} \quad y_i = \frac{z_i K_i}{\{ \theta (K_i - 1) + 1 + (\xi) r \tau \}} \quad (1)$$

Recordando que  $\sum y_i - \sum x_i = 0$ :

$$\sum \frac{z_i (K_i - 1)}{\{ \theta (K_i - 1) + 1 + (\xi) r \tau \}} = 0 \quad (2)$$

*Estrategia para resolver el algoritmo:*

1. Ingresar los valores de  $T$ ,  $P$ ,  $k$ ,  $\rho$  y  $\tau$ .
2. Proponer un valor de inicialización para  $\theta$ ,  $x_i$  e  $y_i$ .
3. Calcular  $K_i$  y  $r$ .
4. Evaluar la Ec. (2). Si el valor de la función de discrepancia no satisface el error permitido continuar con el paso 5. De lo contrario, ir al paso 6.
5. Por medio de algún método iterativo (Newton-Raphson, Sustitución Directa), proponer un nuevo valor para  $\theta$  y volver al paso 2.
6. Calcular a partir de  $\theta$  y  $K_i$  el valor de las composiciones  $x_i$  e  $y_i$  utilizando las Ecs. (1).
7. Comparar los valores de  $x_i$  e  $y_i$  con los utilizados en la iteración anterior. Si coinciden, dentro de un determinado error, seguir con el paso 8. Caso contrario, proponer los nuevos valores para  $x_i$  e  $y_i$  para la nueva iteración (Sustitución Directa, Wegstein) y retornar al paso 2.
8. Con los valores de  $\theta$ ,  $x_i$  e  $y_i$  calcular los valores de los caudales  $L$ ,  $V$  y el calor  $Q$ .
9. Parar.

Notar que el algoritmo se puede generalizar proponiendo una reacción “genérica” como la que se muestra en el Capítulo XV del libro Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos.

### **Problema 6:**

Obtener una ecuación similar a la utilizada para resolver el flash en función  $\theta$ , pero utilizando la definición  $\psi = L/F$ , en lugar de  $\theta$ .

- a- ¿Puede obtenerse a partir de esta ecuación las expresiones para el cálculo de la temperatura de burbuja y de rocío? ¿Qué debe cambiarse sobre el razonamiento basado en  $\theta$ ?
- b- ¿Puede obtenerse a partir de la expresión hallada  $f(\psi)$  la ya obtenida  $f(\theta)$ ? ¿Cómo debe procederse?
- c- Resuelva algunos de los problemas anteriores utilizando  $f(\psi)$  en lugar de  $f(\theta)$ .

*Respuesta:*

Balance de materia por componentes:  $F z_i = V y_i + L x_i$

Además:

- $\psi = L/F \Rightarrow L = \psi F$
- $L = F - V \Rightarrow \psi F = F - V \Rightarrow V = F(1 - \psi)$
- $y_i = K_i x_i$

Reemplazando en el balance por componente se obtiene:

$$F z_i = F(1 - \psi) K_i x_i + \psi F x_i \Rightarrow z_i = x_i [ \psi(1 - K_i) + K_i ];$$

despejando  $x_i$ :

$$x_i = \frac{z_i}{\psi(1 - K_i) + K_i}$$

y por medio de  $y_i = K_i x_i \Rightarrow x_i = y_i/K_i$ :

$$y_i = \frac{z_i K_i}{\psi(1 - K_i) + K_i}$$

Luego, utilizando la siguiente ecuación, que debe cumplirse necesariamente por definición, ya que ambos términos deben sumar la unidad,  $\sum_{i=1}^{NC} y_i - \sum_{i=1}^{NC} x_i = 0$ . Reemplazando en esta última ecuación las dos anteriores se obtiene:

$$\sum_{i=1}^{NC} \frac{z_i(1 - K_i)}{\psi(1 - K_i) + K_i} = 0$$

A partir de esta ecuación también se pueden hallar las expresiones para el cálculo de la temperatura de burbuja y rocío, invirtiendo el valor al que tiende el límite entre ambas. Las mismas son las siguiente:

- Temperatura de Burbuja

$$\lim_{\psi \rightarrow 1} \left( \sum_{i=1}^{NC} \frac{z_i(1 - K_i)}{\psi(1 - K_i) + K_i} \right) = 0 \Rightarrow \text{debe cumplirse que } \boxed{\sum_{i=1}^{NC} z_i(1 - K_i) = 0}$$

- Temperatura de Rocío

$$\lim_{\psi \rightarrow 0} \left( \sum_{i=1}^{NC} \frac{z_i(1 - K_i)}{\psi(1 - K_i) + K_i} \right) = 0 \Rightarrow \text{debe cumplirse que } \boxed{\sum_{i=1}^{NC} \frac{z_i(1 - K_i)}{K_i} = 0}$$

A partir de la expresión  $f(\psi)$  se puede regresar a la ecuación  $f(\theta)$  de la siguiente manera:

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

Cualquiera de los problemas anteriores en donde se utiliza la expresión  $f(\theta)$  se puede resolver de igual forma reemplazando dicha expresión por la de  $f(\psi)$ .

### **Problema 7:**

Suponer que el equipo funciona a temperatura muy alta y pese a la aislación, las pérdidas de calor por convección, radiación y conducción son muy importantes. Suponer además que puede aproximarse la cantidad de energía disipada según la siguiente expresión:  $Q_p = U(T - T_a)$ , donde  $Q_p$  es el calor disipado,  $T$  la temperatura del flash y  $T_a$  la del ambiente.  $U$  es el coeficiente global de transferencia de calor, que se supone constante y dato. Implementar el algoritmo para el flash isotérmico y adiabático, teniendo en cuenta este nuevo factor.

A- *Flash isotérmico:*

- Balance de materia global:  $F = V + L$



- Balance de materia por componentes:  $F z_i = V y_i + L x_i$
- Balance de energía:  $F HF = V HV + L HL + Q_p + Q$

Siendo:

- $F, L$  y  $V$  las corrientes de alimentación, de salida líquida y de salida vapor, correspondientemente.
- $z_i, x_i$  e  $y_i$  las composiciones de las corrientes  $F, L$  y  $V$ , respectivamente.
- $HF, HL$  y  $HV$  las entalpías de las corrientes  $F, L$  y  $V$ , respectivamente.
- $i = 1, 2, \dots, NC$  componentes.
- $Q_p$  el calor disipado por pérdidas.
- $Q$  el calor necesario entregar o quitar.

Hipótesis:

Se supone que la temperatura ( $T$ ) y la presión ( $P$ ) del equipo, el coeficiente global de transferencia de calor ( $U$ ) y la temperatura ambiente ( $T_a$ ) son datos y constantes; y que  $K_i = K_i(T, P, x_i, y_i)$ .

Algoritmo de resolución propuesto:

1. Ingresar los valores de  $T, P, U$  y  $T_a$ .
2. Adoptar valores iniciales para  $\theta, x_i$  e  $y_i$ .
3. Calcular  $K_i = K_i(T, P, x_i, y_i)$ .
4. Resolver  $\sum_{i=1}^{NC} \frac{z_i (K_i - 1)}{\theta (K_i - 1) + 1} = 0$  por algún procedimiento iterativo (por ejemplo: Newton-Raphson).
5. Con el valor de  $\theta$ , recalcular los valores de  $x_i$  e  $y_i$  por medio de las ecuaciones:  $x_i = \frac{z_i}{\theta (K_i - 1) + 1}$   
e  $y_i = \frac{z_i K_i}{\theta (K_i - 1) + 1}$ . Si estos valores coinciden con los utilizados en la iteración anterior (dentro de un error preestablecido) para calcular  $K_i$ , continuar con el paso 6. De lo contrario, proponer un nuevo vector de valores  $x_i$  e  $y_i$  (por ejemplo: Sustitución Directa, Wegstein) y retornar al paso 3.
6. Calcular a través del balance de energía ( $Q = F HF - V HV - L HL - Q_p$ ), el valor de  $Q$ .
7. Calcular los caudales  $L$  y  $V$  ( $L = \theta F$  y  $L = F - V$ ).
8. Parar.

Nota: las ecuaciones utilizadas en los pasos 4, 5 y 7, ya fueron deducidas en problemas anteriores.

#### B- Flash adiabático:

Para implementar el algoritmo de un flash “adiabático”, primero se debe modificar el balance de energía y luego trabajarlo algebraicamente para explicitarlo en función de las variables.

- Balance de energía:  $F HF = V HV + L HL + Q_p$

Dividiendo ambos miembros por  $F HF$ :

$$1 = \frac{V HV}{F HF} + \frac{L HL}{F HF} + \frac{Q_p}{F HF} \Rightarrow 1 = \theta \frac{HV}{HF} + (1 - \theta) \frac{HL}{HF} + \frac{Q_p}{F HF} \Rightarrow$$

$$\boxed{1 - \theta \frac{HV}{HF} - (1 - \theta) \frac{HL}{HF} - \frac{Q_p}{F HF} = 0}$$

Recordar que  $\theta = V/F$ . El hecho de dividir todos los términos por  $HF$  es para trabajar con las dos ecuaciones,  $f(\theta)$ , dentro de un orden relativo de magnitudes similares, lo cual elimina problemas numéricos y errores de redondeo durante el proceso de iteración.

Hipótesis:

Se adoptan las mismas hipótesis que para el caso isotérmico, a diferencia de que ahora la temperatura ( $T$ ) del flash no se conoce y se debe calcular.

Algoritmo propuesto:

1. Ingresar los valores de  $P$ ,  $U$  y  $T_a$ .
2. Adoptar valores iniciales para  $\theta$ ,  $T$ ,  $x_i$  e  $y_i$ .
3. Calcular  $K_i = K_i(T, P, x_i, y_i)$ .
4. Resolver las ecuaciones  $\sum_{i=1}^{NC} \frac{z_i(K_i - 1)}{\theta(K_i - 1) + 1} = 0$  y  $1 - \theta \frac{HV}{HF} - (1 - \theta) \frac{HL}{HF} - \frac{Q_p}{F HF} = 0$ . Si satisfacen la condición de error continuar con el paso 6. Caso contrario, seguir con el 5.
5. Mediante algún método iterativo simultáneo (por ejemplo: Newton –Raphson) obtener los nuevos valores de  $\theta$  y  $T$  para la próxima iteración y retornar al paso 3.
6. Evaluar ecuaciones:  $x_i = \frac{z_i}{\theta(K_i - 1) + 1}$  e  $y_i = \frac{z_i K_i}{\theta(K_i - 1) + 1}$ . Comparar los valores obtenidos con los de la iteración anterior. Si los mismos coinciden dentro del error especificado pasar al punto 7. De otra manera, calcular los nuevos valores de  $x_i$  e  $y_i$  (por ejemplo: Sustitución Directa, Wegstein) y volver al paso 3.
7. Calcular los caudales  $L$  y  $V$  por medio de las ecuaciones  $L = \theta F$  y  $L = F - V$ .
8. Parar.

### **Problema 8:**

Suponer que la mezcla de la mezcla de alimentación al flash tiene componentes con una gran diferencia de volatilidad relativa. ¿Cómo puede aprovechar este dato para la inicialización en el caso de un flash isotérmico? ¿Puede ser útil también en el caso del flash adiabático?

*Respuesta:*

Suponer una mezcla de alimentación a un equipo flash conformada por cinco componentes (A, B, C, D y E), donde las volatilidades relativas de A y B son considerablemente mayores que la de los componentes restantes. Por lo tanto se puede suponer como primera aproximación un punto de corte, donde la totalidad de los componentes A y B salen por la corriente vapor, mientras que C, D y E, por la corriente líquida. Como además se conoce la corriente de alimentación ( $F$ ) y su correspondiente composición ( $z_i$ , con  $i = A, B, C, D$  y E), un buen valor inicial para la fracción vaporizada ( $\theta$ ) podría ser:

$$\theta = \frac{V}{L} = \frac{z_A L + z_B L}{L} = \frac{(z_A + z_B)L}{L} = z_A + z_B$$

La suposición anterior también se puede utilizar para estimar un valor inicial para el vector de composiciones  $x_i$  (de la corriente líquida) e  $y_i$  (de la corriente vapor), en el caso de que la mezcla no se trate como ideal.

Esta inicialización es útil tanto para un flash isotérmico como para un flash adiabático, ya que en ambos casos se itera en la variable  $\theta$ .

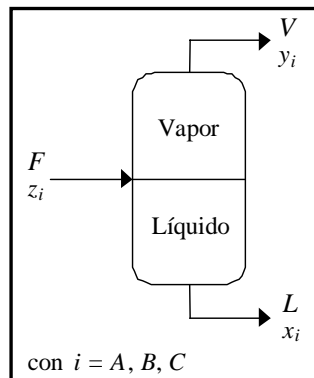
### **Problema 9:**

¿Qué sucede cuando se plantea el cálculo de la temperatura de rocío y de burbuja en una mezcla líquida de tres componentes A, B y C, de composiciones  $x_A$ ,  $x_B$  y  $x_C$ , respectivamente y a la presión  $P$ ? También

se conoce que en la fase líquida se desarrolla, a esas condiciones, la siguiente reacción química:  $A + B \rightarrow C$ ; con constante de equilibrio  $Ke$ , función de la temperatura y presión del sistema, cuya expresión es un dato. ¿Son válidas las ecuaciones desarrolladas en clase? De no ser válidas, ¿cómo debe precederse para el cálculo?

*Hipótesis:*

- Flash isotérmico.
- Mezcla de tres componentes: A, B y C, de composiciones  $x_A$ ,  $x_B$  y  $x_C$ .
- Constante de equilibrio líquido-vapor:  $K_i = K_i(T, P, x_i, y_i)$ ; con  $i = A, B$  y C.
- Presión ( $P$ ): conocida y constante.
- Reacción química en la fase líquida:  $A + B \rightarrow C$ .
- Constante de equilibrio:  $Ke = Ke(T, P)$ , cuya expresión es un dato.
- Densidad del líquido constante.



Balace global de materia:  $F = V + L$  (1)

Balace por componentes:  $F z_i = V y_i + L x_i$  (2)

Constante de equilibrio:  $Ke = \frac{[C]}{[A][B]} = \frac{x_C}{x_A x_B} \xi$  (3)

Donde [ ] simbolizan concentraciones molares y  $\xi$  el factor de conversión de unidades correspondiente.

Trabajando algebraicamente las Ecs. (1) y (2), y empleando las expresiones:  $\theta = V/L$  (fracción vaporizada) e  $y_i = K_i x_i$ , se pueden obtener las expresiones para la temperatura de burbuja (cuando  $\theta$  tiende a cero) y de rocío (cuando  $\theta$  tiende a uno).

- Temperatura de burbuja:  $\sum(z_i K_i) = 1$  (4)

- Temperatura de rocío:  $\sum(z_i / K_i) = 1$  (5)

Las Ecs. (3), (4) y (5) se pueden re-escribir o expresar de la forma:

$$Ke x_A x_B - x_C \xi = 0$$
 (6)

$$\sum(x_i K_i) = 1 \text{ (en el punto de burbuja } z_i \cong x_i)$$
 (7)

$$\sum(y_i / K_i) = 1 \text{ (en el punto de rocío } z_i \cong y_i)$$
 (8)

*Procedimiento de cálculo para determinar la temperatura de burbuja:*

1. Ingresar los valores de  $F$ ,  $P$  y  $x_i$  ( con  $i = A, B, C$ ).
2. Estimar e ingresar un valor para  $T$  y el vector  $y_i$ .
3. Calcular  $K_i = K_i(T, P, x_i, y_i)$ .
4. Calcular  $Ke = Ke(T, P)$ .
5. Evaluar las Ecs. (6) y (7). Si los cálculos satisfacen el criterio de error especificado, continuar con el paso 6. De lo contrario, proponer por medio de métodos numéricos iterativos (Wegstein, por ejemplo) un nuevo valor para  $T$  y el vector de composiciones  $y_i$ , retornando al paso 3.
6. Mostrar los valores obtenidos de  $T$  e  $y_i$ .
7. Parar.

Para calcular la temperatura de rocío se puede utilizar el mismo procedimiento de cálculo que para la temperatura de burbuja salvo que, en el paso 5 se debe evaluar la Ec. (8) en lugar de la Ec. (7).