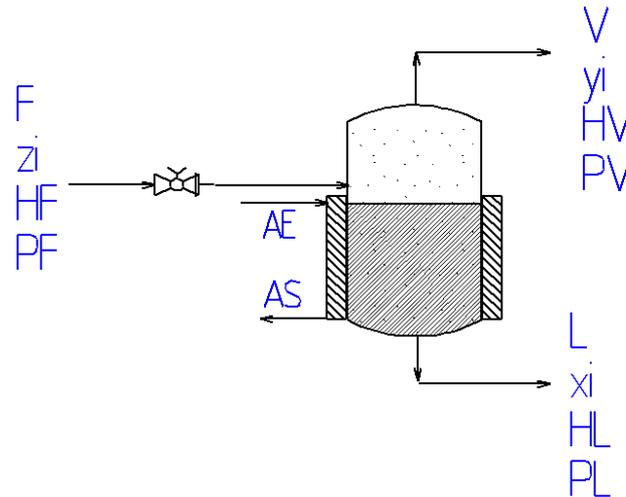
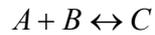


## Flash con reacción química.

El esquema representa un equipo separador LV (flash) con reacción química. Sea por ejemplo la reacción:



### Hipótesis:

- La cinética es elemental:

$$(-r_A) = k_D \times C_A \times C_B - k_I \times C_C$$

$$k_D = A_D \times e^{\left(\frac{-E_D}{R \times T}\right)}$$

$$k_I = A_I \times e^{\left(\frac{-E_I}{R \times T}\right)}$$

- Reacción exotérmica ( $\Delta H_R > 0$ )
- Presión de operación conocida P1.
- Refrigerado con agua.
- $(UA)_{FL}$  conocido.
- Volumen de reacción conocido:  $V_R$

Sea:  $\theta = \frac{V}{F}$  la fracción de vapor (1)

### Balance de materia:

$$F = V + L - \sum_{i=1}^{NC} \varepsilon_i \times (-r_A) \times V_R \quad (2)$$

**Balance por componente:**

$$F \times z_i = V \times y_i + L \times x_i - \varepsilon_i \times (-r_A) \times V_R \quad \text{con } i=1 \text{ a } NC \quad (3)$$

De (1):  $V = F \times \theta$  (4)

Reemplazando en (2)

$$F = \theta \times F + L - \sum_{i=1}^{NC} \varepsilon_i \times (-r_A) \times V_R$$
$$L = F(1 - \theta) + \sum_{i=1}^{NC} \varepsilon_i \times (-r_A) \times V_R \quad (5)$$

Siendo:  $y_i = k_i \times x_i$  para  $i=1$  a  $NC$  (6)

Reemplazando (4), (5) y (6) en (3):

$$F \times z_i = \theta \times F \times x_i \times k_i + \left[ F(1 - \theta) + \sum_{i=1}^{NC} \varepsilon_i \times (-r_A) \times V_R \right] \times x_i - \varepsilon_i \times (-r_A) \times V_R$$

Dividiendo por F ambos miembros:

$$z_i = \theta \times x_i \times k_i + \left[ (1 - \theta) + \frac{\sum_{i=1}^{NC} \varepsilon_i \times (-r_A) \times V_R}{F} \right] \times x_i - \frac{\varepsilon_i \times (-r_A) \times V_R}{F}$$

$$z_i = x_i \times \left[ \theta \times k_i + (1 - \theta) + \frac{\sum_{i=1}^{NC} \varepsilon_i \times (-r_A) \times V_R}{F} \right] - \frac{\varepsilon_i \times (-r_A) \times V_R}{F}$$

$$x_i = \frac{z_i + \varepsilon_i \times (-r_A) \times V_R / F}{\left[ \theta \times k_i + (1 - \theta) + \left( \frac{\sum_{i=1}^{NC} \varepsilon_i \times (-r_A) \times V_R}{F} \right) / F \right]}$$

$$y_i = k_i \times \frac{z_i + \varepsilon_i \times (-r_A) \times V_R / F}{\left[ \theta \times k_i + (1 - \theta) + \left( \frac{\sum_{i=1}^{NC} \varepsilon_i \times (-r_A) \times V_R}{F} \right) / F \right]}$$

$$\sum_{i=1}^{NC} x_i = 1 \quad \sum_{i=1}^{NC} y_i = 1$$

$$\sum_{i=1}^{NC} x_i - \sum_{i=1}^{NC} y_i = 0$$

$$\sum_{i=1}^{NC} \left[ \frac{z_i + \varepsilon_i \times (-r_A) \times V_R / F}{\theta \times k_i + (1-\theta) + \left( \sum_{i=1}^{NC} \varepsilon_i \times (-r_A) \times V_R \right) / F} \right] - \sum_{i=1}^{NC} k_i \times \left[ \frac{z_i + \varepsilon_i \times (-r_A) \times V_R / F}{\theta \times k_i + (1-\theta) + \left( \sum_{i=1}^{NC} \varepsilon_i \times (-r_A) \times V_R \right) / F} \right] = 0$$

$$\sum_{i=1}^{NC} \frac{(1-k_i) \times [z_i + \varepsilon_i \times (-r_A) \times V_R / F]}{\left[ \theta \times k_i + (1-\theta) + \left( \sum_{i=1}^{NC} \varepsilon_i \times (-r_A) \times V_R \right) / F \right]} = 0 \quad (7)$$

Cuando no hay reacción química ambos términos se anulan y queda:

$$\sum_{i=1}^{NC} \frac{(1-k_i) \times z_i}{[\theta \times k_i + (1-\theta)]} = 0$$

O

$$\sum_{i=1}^{NC} \frac{(1-k_i) \times z_i}{[\theta \times (k_i - 1) + 1]} = 0$$

Que es la ecuación estándar para el flash.

### Balance de energía:

$$F \times H_F = V \times H_V + L \times H_L + \sum_{i=1}^{NC} \varepsilon_i \times (-r_A) \times V_R \times (-\Delta H_R) + Q_R \quad (8)$$

### Camisa de refrigeración:

$$F_{AS} = F_{AE}$$

$$x_w^{AS} = x_w^{AE}$$

Siendo w, agua pura. Asumiendo constancia en el CP:

$$Q_R = F_{AE} \times C_p \times (T_{AS} - T_{AE}) \quad (9)$$

Dado que el calor debe atravesar las capas de ensuciamiento, las capas límites (de ambos fluidos) y la pared del tubo, se define un coeficiente global de transferencia de calor U y un área de intercambio térmico A como un solo parámetro  $(UA)_R$ . Nos queda la tercera ecuación de energía:

$$Q_R = (UA)_R \times \Delta T$$

Por hipótesis de mezclado completo:

$$Q_R = (UA)_R \times (T - T_{AS}) \quad (10)$$

Donde T es la temperatura del flash que por condición de equilibrio es además igual a  $T_L$  y  $T_V$ .

### Propiedades termodinámicas.

Entalpías:

$$H_F = \sum_{i=1}^{NC} z_i \times H_i(T_F)$$

$$H_V = \sum_{i=1}^{NC} y_i \times H_i(T_V, P_V)$$

$$H_L = \sum_{i=1}^{NC} x_i \times H_i(T_L)$$

Otras relaciones:

$$T_V = T_L = T$$

$$x_i = \frac{C_i}{\sum_{i=1}^{NC} C_i} \quad \text{para } i=1 \text{ a } NC$$

$$k_i = \frac{\gamma_i \times P_V(T)}{P} \quad \text{para } i=1 \text{ a } NC$$

### Resolución:

Para resolver la ecuación fundamental del flash (la 7) debemos saber las concentraciones de todos sus componentes en la fase líquida, y su temperatura a fin de que sólo  $\theta$  sea incognita.

Para ello se propone el siguiente algoritmo general:

1. Estimar un valor para la temperatura ( $T^*$ )
2. Calcular las constantes cinéticas  $K_D$  y  $K_i$ .
3. Calcular las presiones de vapor de los NC componentes
4. Estimar NC concentraciones molares para todos los componentes
5. Calcular todas las fracciones molares.
6. Calcular los NC coeficientes de actividad por algún modelo en particular
7. Calcular las NC constantes de equilibrio

8. Calcular la velocidad de reacción ( $-r_A$ )
9. Mediante la ecuación (7) y por métodos iterativos hallar el valor de  $\theta$ .
10. Calcular las corrientes de salidas del flash ( $L, V, x_i, y_i, C_i$ )
11. Comparar las NC concentraciones ( $C_i$ ) calculadas en el paso 10 con los valores estimados en el paso 4. Si la norma del vector formados por las diferencias entre ambos son superior a la tolerancia, asumir los últimos valores para las concentraciones y volver al paso 5. Si la norma es inferior a la tolerancia se va al paso siguiente.
12. Se calculan las entalpías de todas la corrientes.
13. De la ecuación (8) se calcula el calor intercambiado  $Q_R$ .
14. De la ecuación (9) la temperatura de salida del agua de enfriamiento ( $T_{AS}$ )
15. De la ecuación (10) la temperatura del flash ( $T$ )
16. Se compara al valor absoluto de la diferencia de temperaturas entre el valor estimado ( $T^*$ ) y el calculado ( $T$ ). Si ese valor supera la tolerancia, se asume  $T^*=T$  y se vuelve al paso 2. En cambio si el error absoluto es menor a la tolerancia se avanza al paso siguiente.
17. Se imprimen o guardan los resultados
18. FIN