Integración IV

Modelado individual de equipos en estado estacionario (II).

2022

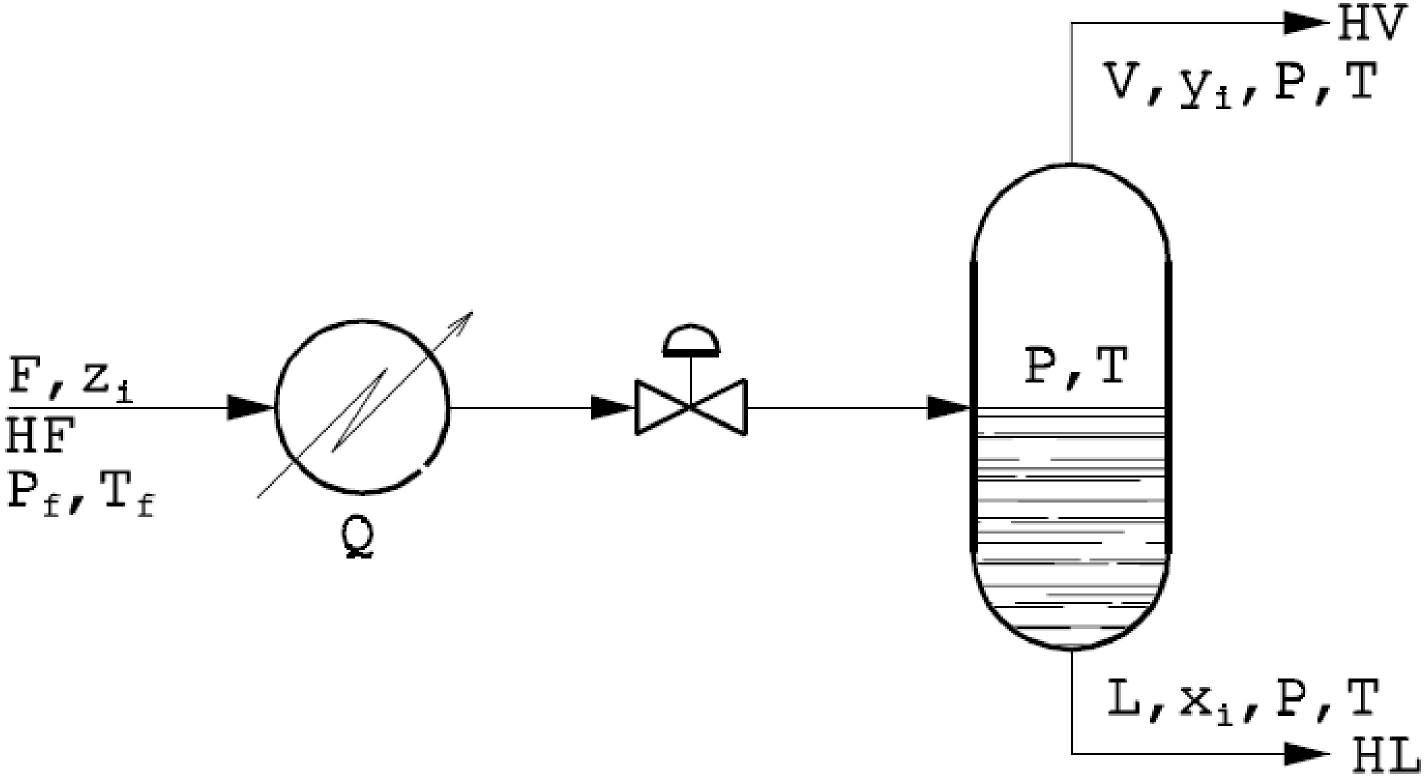
Profesor: Dr. Nicolás J. Scenna
JTP: Dr. Néstor H. Rodríguez
Aux. 1ra: Dr. Juan I. Manassaldi

Modelo de un evaporador flash

- Consiste en una etapa simple de equilibrio.
- Puede extenderse al equilibrio (L-V), (L-L) o (L-L-V).
- El modelado de varias operaciones unitarias está directa o indirectamente vinculado con el modelado de un flash.

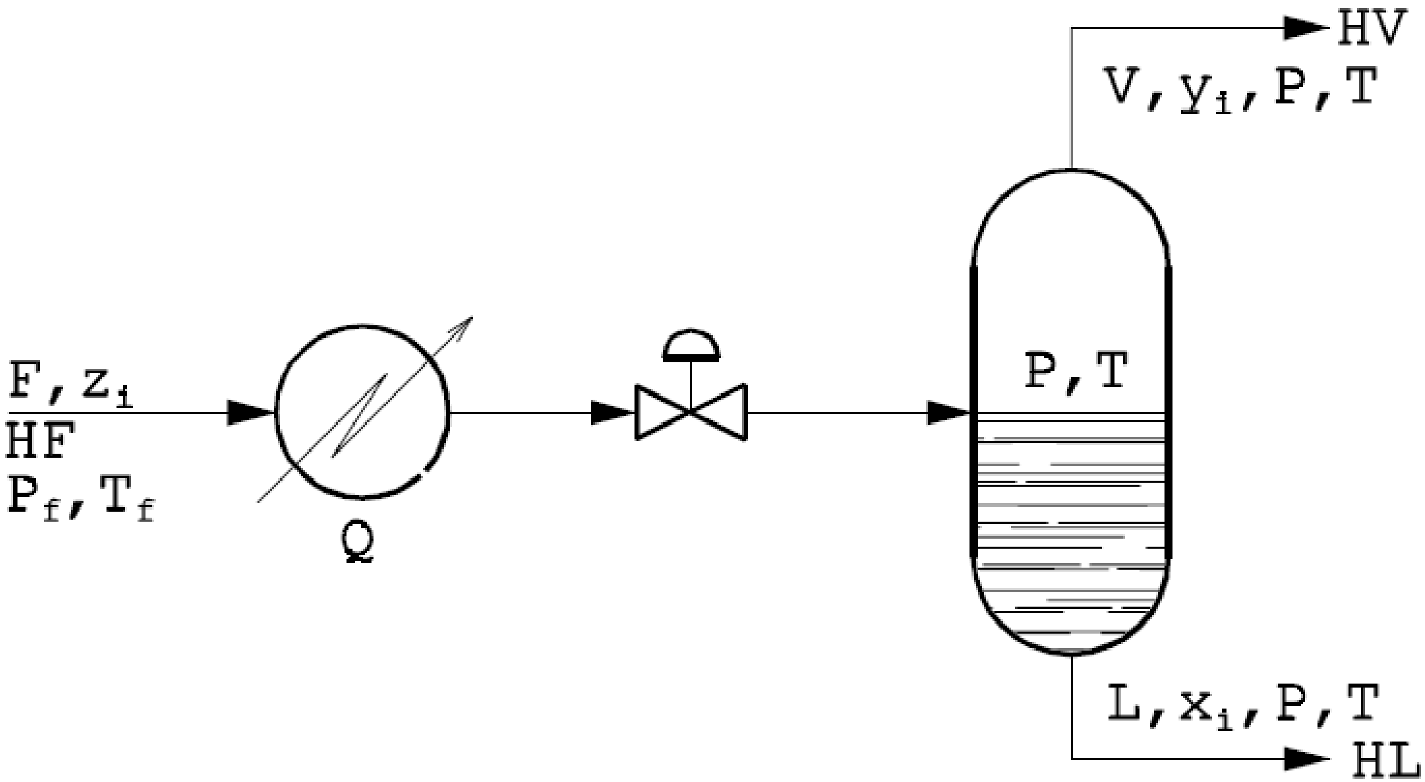
Modelo de un flash

- La alimentación se calienta en el equipo de intercambio y luego se expande en forma adiabática a través de la válvula.



Modelo de un flash

- La vaporización que se produce, a partir de la caída brusca de presión, implica la formación de dos fases, las cuales son separadas gracias al tiempo de contacto entre las mismas que permite el tambor separador.



Modelo de un flash

Hipótesis:

1. El vapor y líquido tienen el tiempo de contacto suficiente para lograr equilibrio (no se tienen en cuenta los parámetros geométricos).
2. La presión de líquido y vapor son las del tambor separador ($\Delta P = 0$). Esto implica que no consideramos componentes usuales en el equipo (por ejemplo: separadores de gotas) y la caída de presión que se origina en ellos.
3. Existe sólo una única fase líquida (VLE).
4. No existen reacciones químicas.

Modelo de un flash

$$Fz_i - Vy_i - Lx_i = 0 \qquad \forall i$$

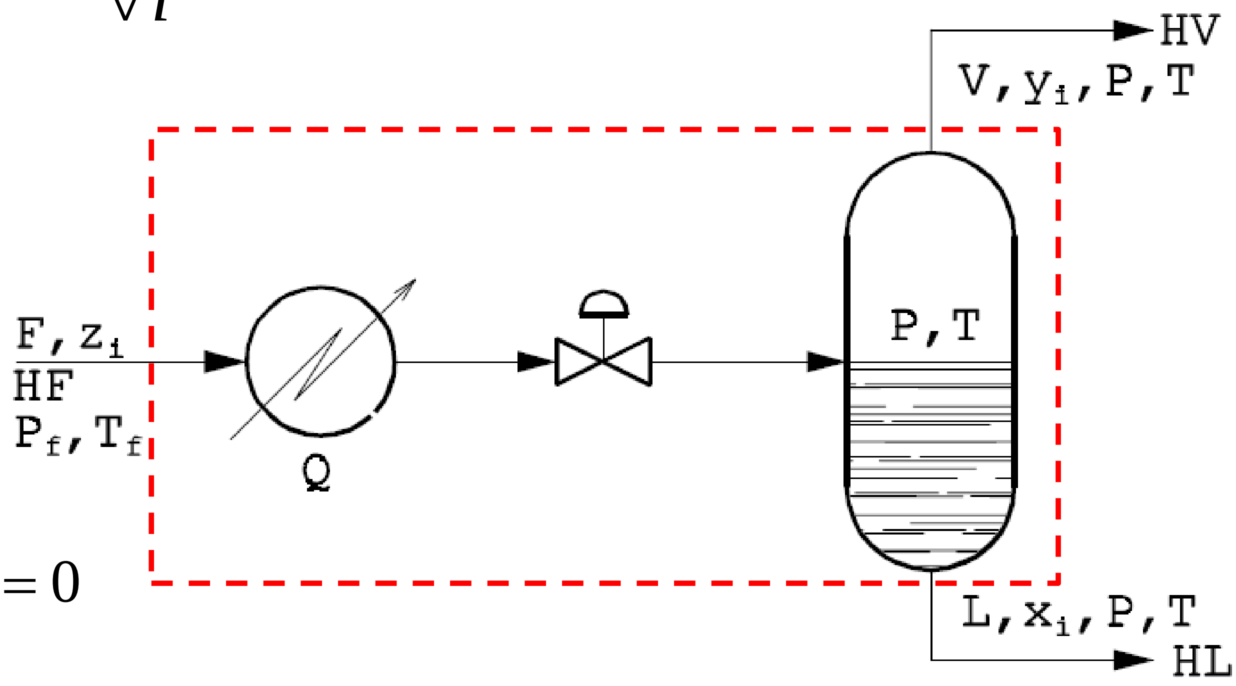
$$\sum_i z_i = 1$$

$$\sum_i y_i = 1$$

$$\sum_i x_i = 1$$

$$FH_F - VH_V - LH_L + Q = 0$$

$$y_i = K_i x_i \qquad \forall i$$



$$f\left(H_F, T_F, P_F, z\right) = 0$$

$$H_V = f\left(T, P, y\right)$$

$$H_L = f\left(T, P, x\right)$$

$$K_i = f\left(T, P, x, y\right) \qquad \forall i$$

La fase es conocida

Modelo de un flash

$$Fz_i - Vy_i - Lx_i = 0 \qquad \forall i$$

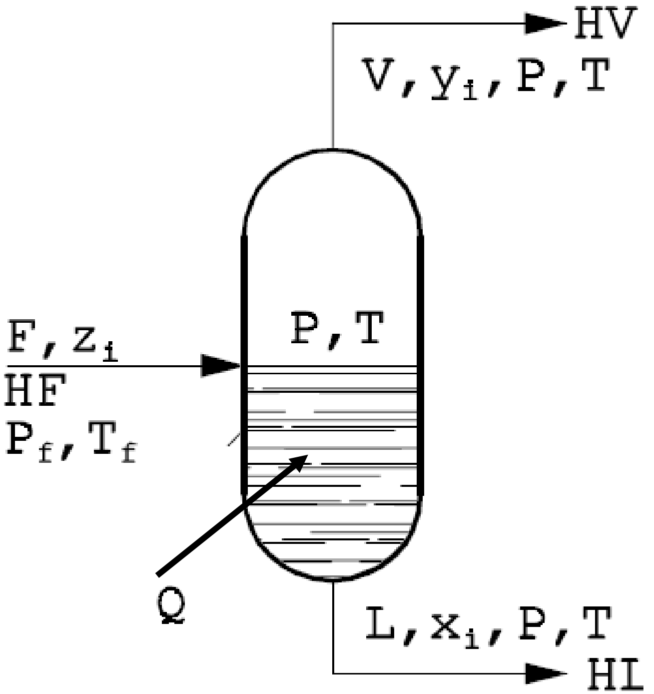
$$\sum_i z_i = 1$$

$$\sum_i y_i = 1$$

$$\sum_i x_i = 1$$

$$FH_F - VH_V - LH_L + Q = 0$$

$$y_i = K_i x_i \qquad \forall i$$



$$f\left(H_F, T_F, P_F, z\right) = 0$$

$$H_V = f\left(T, P, y\right)$$

$$H_L = f\left(T, P, x\right)$$

$$K_i = f\left(T, P, x, y\right) \qquad \forall i$$

Modelo de un flash

$$Fz_i - Vy_i - Lx_i = 0 \qquad \forall i$$

$$\sum_i z_i = 1$$

$$\sum_i y_i = 1$$

$$\sum_i x_i = 1$$

$$FH_F - VH_V - LH_L + Q = 0$$

$$y_i = K_i x_i \qquad \forall i$$

$$f\left(H_F, T_F, P_F, z\right) = 0$$

$$H_V = f\left(T, P, y\right)$$

$$H_L = f\left(T, P, x\right)$$

$$K_i = f\left(T, P, x, y\right) \qquad \forall i$$

$F \quad z_i \quad T_F \quad P_F \quad H_F$

$V \quad y_i \quad H_V$

$L \quad x_i \quad H_L$

$K_i \quad Q \quad T \quad P$

11 + 4i variables

− 7 + 3i ecuaciones

4+i Grados de libertad

Modelo de un flash

$$Fz_i - Vy_i - Lx_i = 0 \qquad \forall i$$

$$\cancel{\sum_i z_i = 1}$$

$$\sum_i y_i = 1$$

$$\sum_i x_i = 1$$

$$FH_F - VH_V - LH_L + Q = 0$$

$$y_i = K_i x_i \qquad \forall i$$

$$\cancel{f\left(H_F, T_F, P_F, z\right) = 0}$$

$$H_V = f\left(T, P, y\right)$$

$$H_L = f\left(T, P, x\right)$$

$$K_i = f\left(T, P, x, y\right) \qquad \forall i$$

$\cancel{F}$ $\cancel{z_i}$ $\cancel{T_F}$ $\cancel{P_F}$ $\cancel{H_F}$

V y_i H_V

L x_i H_L

K_i Q T P

7 + 3i variables

− 5 + 3i ecuaciones

2 Grados de libertad

Modular secuencial

Modelo de un flash

$$Fz_i - Vy_i - Lx_i = 0 \qquad \forall i$$

$$\sum_i y_i = 1$$

$$\sum_i x_i = 1$$

$$FH_F - VH_V - LH_L + Q = 0$$

$$y_i = K_i x_i \qquad \forall i$$

$$K_i = f\left(T, P, x, y\right) \qquad \forall i$$

$$H_V = f\left(T, P, y\right)$$

$$H_L = f\left(T, P, x\right)$$

$V \quad y_i \quad H_V$

$L \quad x_i \quad H_L$

$K_i \quad Q \quad T \quad P \quad \theta$

8 + 3i variables

– 6 + 3i ecuaciones

2 Grados de libertad

$$\boxed{\theta = \frac{V}{F}}$$

Fracción de vaporización

Modelo de un flash

$$Fz_i - F\theta y_i - Lx_i = 0 \qquad \forall i$$

$$\sum_i y_i = 1$$

$$\sum_i x_i = 1$$

$$FH_F - F\theta H_V - LH_L + Q = 0$$

$$y_i = K_i x_i \qquad \forall i$$

$$K_i = f\left(T, P, x, y\right) \qquad \forall i$$

$$H_V = f\left(T, P, y\right)$$

$$H_L = f\left(T, P, x\right)$$

$y_i \quad H_V$

$L \quad x_i \quad H_L$

$K_i \quad Q \quad T \quad P \quad \theta$

7 + 3i variables

− 5 + 3i ecuaciones

2 Grados de libertad

Modelo de un flash

$$Fz_i - F\theta y_i - Lx_i = 0 \quad \forall i$$

$$\sum_i y_i = 1$$

$$\sum_i x_i = 1$$

$$FH_F - F\theta H_V - LH_L + Q = 0$$

$$y_i = K_i x_i \quad \forall i$$

$$K_i = f\left(T, P, x, y\right) \quad \forall i$$

$$H_V = f\left(T, P, y\right)$$

$$H_L = f\left(T, P, x\right)$$

$y_i \quad H_V$

$L \quad x_i \quad H_L$

$K_i \quad Q \quad \boxed{T \quad P} \; \theta$

5 + 3i variables

− 5 + 3i ecuaciones

0 Grados de libertad

Se especifican T y *P*

Flash Isotérmico

Modelo de un flash

$$Fz_i - F\theta y_i - Lx_i = 0 \quad \forall i$$

$$\sum_i y_i = 1$$

$$\sum_i x_i = 1$$

$$FH_F - F\theta H_V - LH_L + Q = 0$$

$$y_i = K_i x_i \quad \forall i$$

$$K_i = f\left(T, P, x, y\right) \quad \forall i$$

$$H_V = f\left(T, P, y\right)$$

$$H_L = f\left(T, P, x\right)$$

$y_i \quad H_V$

$L \quad x_i \quad H_L$

$K_i \quad \boxed{Q} \quad T \quad P \quad \theta$

6 + 3i variables

− 5 + 3i ecuaciones

1 Grados de libertad

Presión o Temperatura

Se especifica Q=0

Flash Adiabático

Modelo de un flash

$$Fz_i - F\theta y_i - Lx_i = 0 \quad \forall i$$

$$\sum_i y_i = 1$$

$$\sum_i x_i = 1$$

$$FH_F - F\theta H_V - LH_L + Q = 0$$

$$y_i = K_i x_i \quad \forall i$$

$$K_i = f\left(T, P, x, y\right) \quad \forall i$$

$$H_V = f\left(T, P, y\right)$$

$$H_L = f\left(T, P, x\right)$$

$y_i \quad H_V$

$L \quad x_i \quad H_L$

$K_i \quad Q \quad T \quad P \quad \boxed{\theta}$

6 + 3i variables

− 5 + 3i ecuaciones

1 Grados de libertad

Presión o Temperatura

Se especifica θ

Flash a fracción de vaporización dada

Modelo de un flash (función auxiliar)

$$Fz_i - F\theta y_i - Lx_i = 0 \qquad \forall i$$

$$\sum_i \left(Fz_i - F\theta y_i - Lx_i \right) = \sum_i 0$$

$$\sum_i Fz_i - \sum_i F\theta y_i - \sum_i Lx_i = 0$$

$$F\underbrace{\sum_i z_i}_{=1} - F\theta \underbrace{\sum_i y_i}_{=1} - L\underbrace{\sum_i x_i}_{=1} = 0$$

$$\boxed{F - F\theta - L = 0}$$

Balance de materia global

$$L = F\left(1-\theta\right)$$

$$\cancel{F}z_i - \cancel{F}\theta y_i - \cancel{F}\left(1-\theta\right)x_i = 0 \qquad \forall i$$

$$z_i - \theta y_i - \left(1-\theta\right)x_i = 0 \qquad \forall i \qquad \Leftarrow \qquad y_i = K_i x_i \qquad \forall i$$

$$\boxed{z_i - \theta K_i x_i - \left(1-\theta\right)x_i = 0 \qquad \forall i}$$

Modelo de un flash (función auxiliar)

$$z_i - \theta K_i x_i - \left(1-\theta\right) x_i = 0 \qquad \forall i$$

$$z_i - x_i \left(\theta K_i + 1 - \theta\right) = 0 \qquad \forall i$$

$$z_i - x_i \left(\theta \left(K_i - 1\right) + 1\right) = 0 \qquad \forall i$$

$$z_i = x_i \left(\theta \left(K_i - 1\right) + 1\right) \qquad \forall i$$

$$\boxed{\begin{aligned} x_i &= \frac{z_i}{\theta\left(K_i - 1\right) + 1} \qquad \forall i \\ y_i &= \frac{K_i z_i}{\theta\left(K_i - 1\right) + 1} \qquad \forall i \end{aligned}}$$

Modelo de un flash (función auxiliar)

$$x_i = \frac{z_i}{\theta\left(K_i - 1\right) + 1} \qquad \forall i \qquad y_i = \frac{K_i z_i}{\theta\left(K_i - 1\right) + 1} \qquad \forall i$$

$$\sum_i y_i - \sum_i x_i = 0$$

$$\sum_i \frac{K_i z_i}{\theta\left(K_i - 1\right) + 1} - \sum_i \frac{z_i}{\theta\left(K_i - 1\right) + 1} = 0$$

$$\boxed{\sum_i \frac{\left(K_i - 1\right) z_i}{\theta\left(K_i - 1\right) + 1} = 0}$$

Rachford y Rice (1952)

Flash isotérmico (Conozco *P* y *T*)

$$\sum_i \frac{(K_i - 1) z_i}{\theta (K_i - 1) + 1} = 0 \qquad K_i = f\left(T, P, \cancel{x, y}\right) \qquad \forall i$$

mezcla ideal

$$\boxed{\sum_i \frac{(K_i - 1) z_i}{\theta (K_i - 1) + 1} = 0}$$

Se debe encontrar el vapor de θ por algún método iterativo

$$\sum_i \frac{(K_i - 1) z_i}{\theta (K_i - 1) + 1} = 0 \qquad K_i = f\left(T, P, x, y\right) \qquad \forall i$$

$$\boxed{\sum_i \frac{(K_i - 1) z_i}{\theta (K_i - 1) + 1} = 0}$$

Para encontrar el valor de θ se debe conocer (o suponer) *x* o/e *y* según sea el caso.

Flash isotérmico – Enfoque γ/ϕ

$$\sum_i \frac{(K_i - 1) z_i}{\theta (K_i - 1) + 1} = 0$$

	Líquido ideal	**Líquido no ideal**
Vapor ideal	$K_i = \frac{P_i^s}{P}$ $K_i = f(T,P)$	$K_i = \frac{\gamma_i P_i^s \,\mathrm{Poy}_i}{P}$ $K_i = f(T,P,x)$
Vapor no ideal	$K_i = \frac{\phi_i^s P_i^s \,\mathrm{Poy}_i}{\phi_i^V P}$ $K_i = f(T,P,y)$ improbable	$K_i = \frac{\gamma_i \phi_i^s P_i^s \,\mathrm{Poy}_i}{\phi_i^V P}$ $K_i = f(T,P,x,y)$

Flash isotérmico – Enfoque ϕ/ϕ

$$\sum_i \frac{\left(K_i - 1\right) z_i}{\theta\left(K_i - 1\right) + 1} = 0$$

	Líquido no ideal
Vapor no ideal	$K_i = \dfrac{\phi_i^L}{\phi_i^V}$ $K_i = f\left(T, P, x, y\right)$

Resolución secuencial (flash isotérmico eq. ideal)

$$K_i = f_{ideal}\left(T,P\right) \qquad \forall i$$ 1

$$\sum_i \frac{\left(K_i - 1\right) z_i}{\theta\left(K_i - 1\right) + 1} = 0 \qquad \rightarrow \theta$$ (método iterativo) 2

$$x_i = \frac{z_i}{\theta\left(K_i - 1\right) + 1} \qquad \forall i \qquad\qquad y_i = K_i x_i \qquad \forall i$$ 3

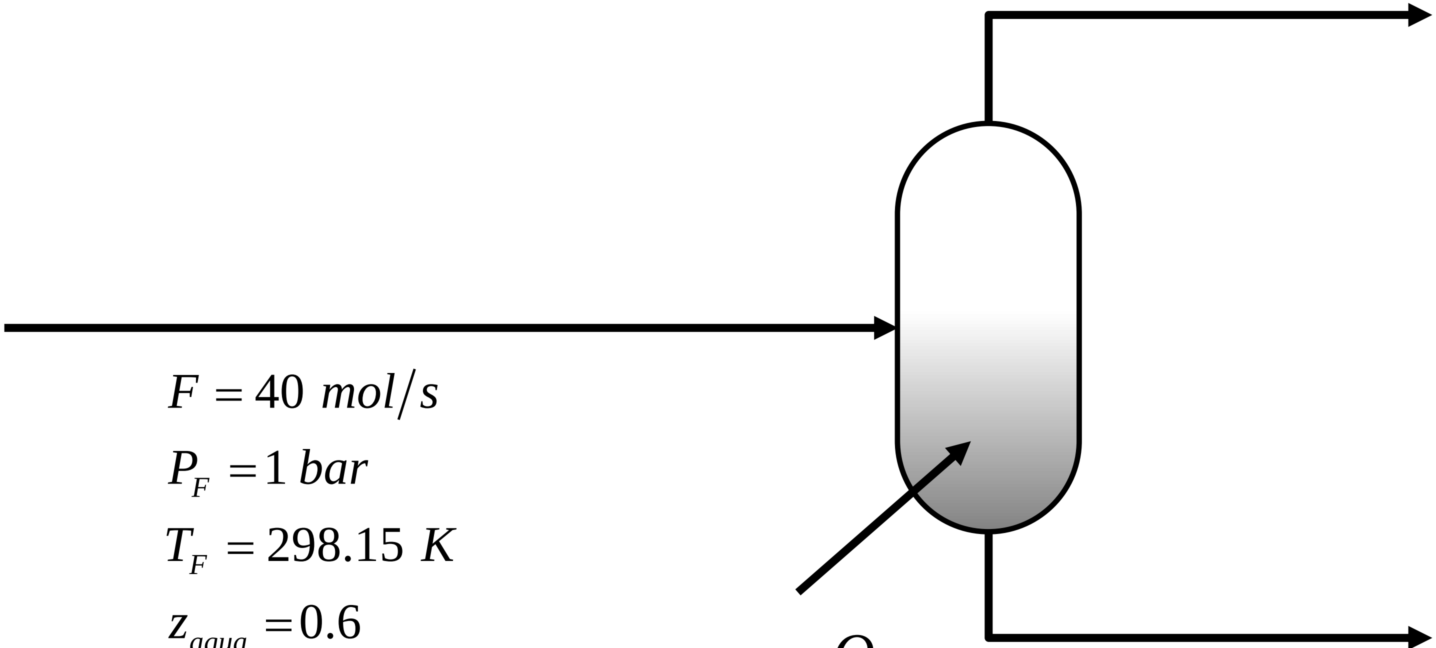
$$H_V = f\left(T,P,y\right) \qquad H_L = f\left(T,P,x\right)$$ 4

$$L = F\left(1-\theta\right) \qquad V = F\theta$$ 5

$$Q = -H_F + \theta H_V + \left(1-\theta\right) H_L$$ 6

¡Balance de energía desacoplado!

Ejemplo: Ley de Raoult



$V =$

$P_V = 1\ bar$

$T_V = 355\ K$

$y_{agua} =$

$y_{MeOH} =$

$F = 40\ mol/s$

$P_F = 1\ bar$

$T_F = 298.15\ K$

$z_{agua} = 0.6$

$z_{MeOH} = 0.4$

$Q =$

$L =$

$P_L = 1\ bar$

$T_L = 355\ K$

$x_{agua} =$

$x_{MeOH} =$

Resolución secuencial (flash isotérmico eq. No ideal)

$$K_i = f\left(T, P, x^*, y^*\right) \quad \forall i$$ Propongo x^* e y^*

$$\sum_i \frac{\left(K_i - 1\right) z_i}{\theta\left(K_i - 1\right) + 1} = 0 \quad \rightarrow \theta$$ (método iterativo)

1

$$x_i = \frac{z_i}{\theta\left(K_i - 1\right) + 1} \quad \forall i \qquad y_i = K_i x_i \quad \forall i$$

Para continuar se debe cumplir que: $x = x^*$ e $y = y^*$

$$H_V = f\left(T, P, y\right) \quad H_L = f\left(T, P, x\right)$$ 2

$$L = F\left(1 - \theta\right) \qquad V = F\theta$$ 3

$$Q = -H_F + \theta H_V + \left(1 - \theta\right) H_L$$ 4

Ejemplo: NRTL – Fase vapor ideal

$NRTL$

$a_{12} = 792.802\ cal/mol$

$a_{21} = -189.047\ cal/mol$

$\alpha_{12} = 0.2999$

$F = 40\ mol/s$

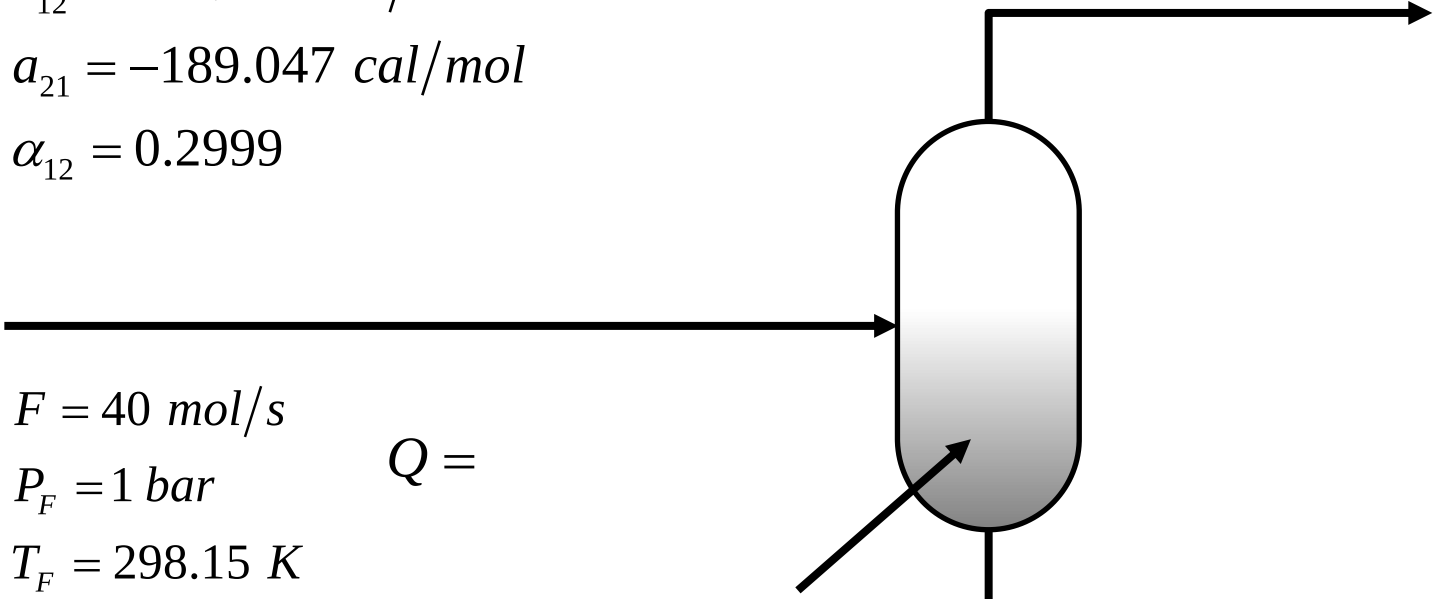
$P_F = 1\ bar$

$T_F = 298.15\ K$

$z_{agua} = 0.6$

$z_{MeOH} = 0.4$

$Q =$



$V =$

$P_V = 1\ bar$

$T_V = 355\ K$

$y_{agua} =$

$y_{MeOH} =$

$L =$

$P_L = 1\ bar$

$T_L = 355\ K$

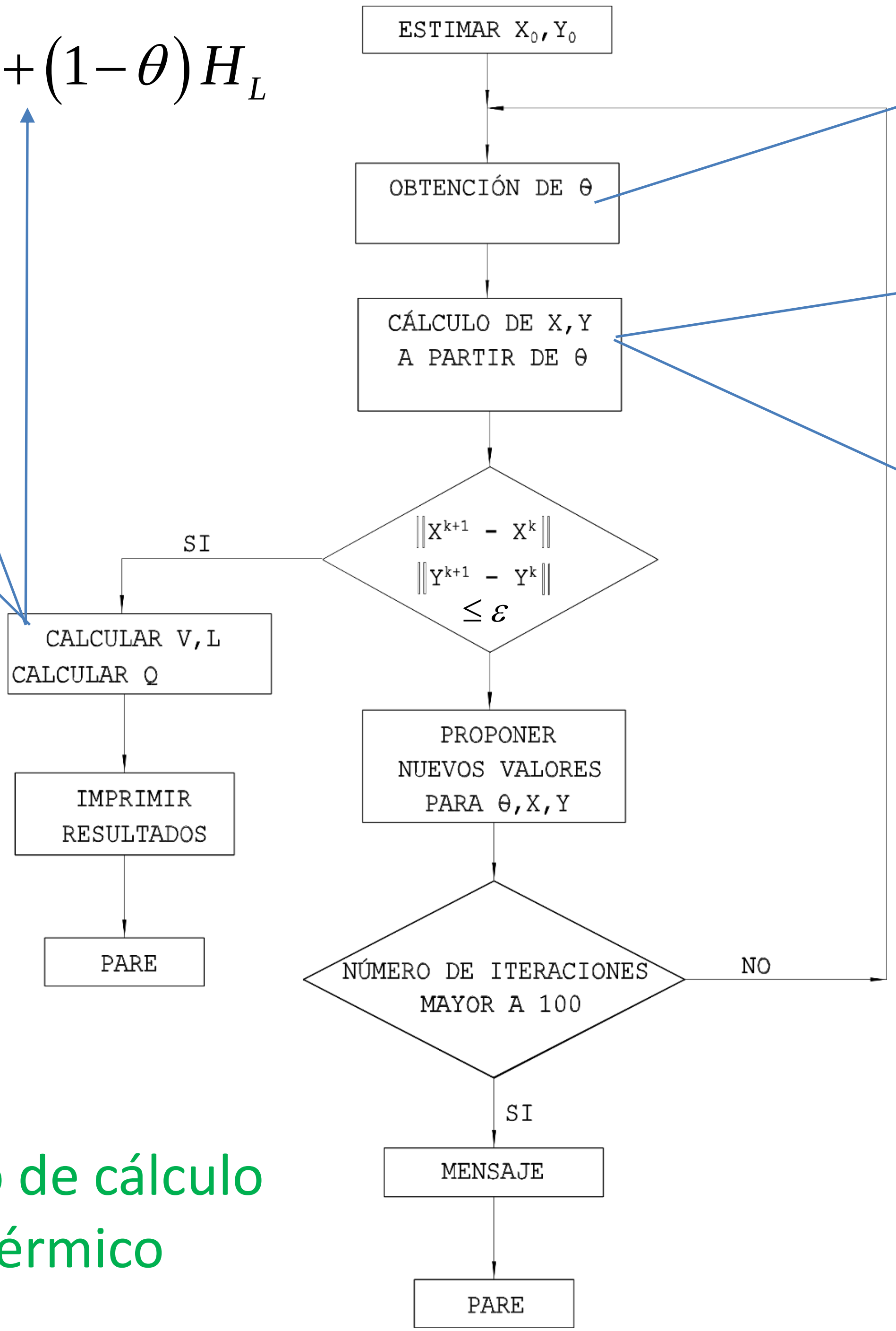
$x_{agua} =$

$x_{MeOH} =$

$$Q = -H_F + \theta H_V + (1-\theta) H_L$$

$$L = F(1-\theta)$$

$$V = F\theta$$



$$\sum_i \frac{(K_i - 1) z_i}{\theta (K_i - 1) + 1} = 0$$

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

$$y_i = K_i x_i$$

Esquema lógico de cálculo de un flash isotérmico

Flash adiabático (Conozco *P* y Q=0)

$$FH_F - F\theta H_V - LH_L + Q = 0$$

$$FH_F - F\theta H_V - F\left(1-\theta\right)H_L = 0$$

$$H_F - \theta H_V - \left(1-\theta\right)H_L = 0$$

$$\boxed{1-\theta\frac{H_V}{H_F} - \left(1-\theta\right)\frac{H_L}{H_F} = 0 \qquad \sum_i \frac{\left(K_i - 1\right)z_i}{\theta\left(K_i - 1\right)+1} = 0}$$

Resolución simultanea (flash adiabático eq. ideal)

$$K_i = f_{ideal}\left(T^*, P\right) \qquad \forall i$$

θ* y T*

$$x_i = \frac{z_i}{\theta^*\left(K_i - 1\right) + 1}$$

$$y_i = K_i x_i \qquad \forall i$$

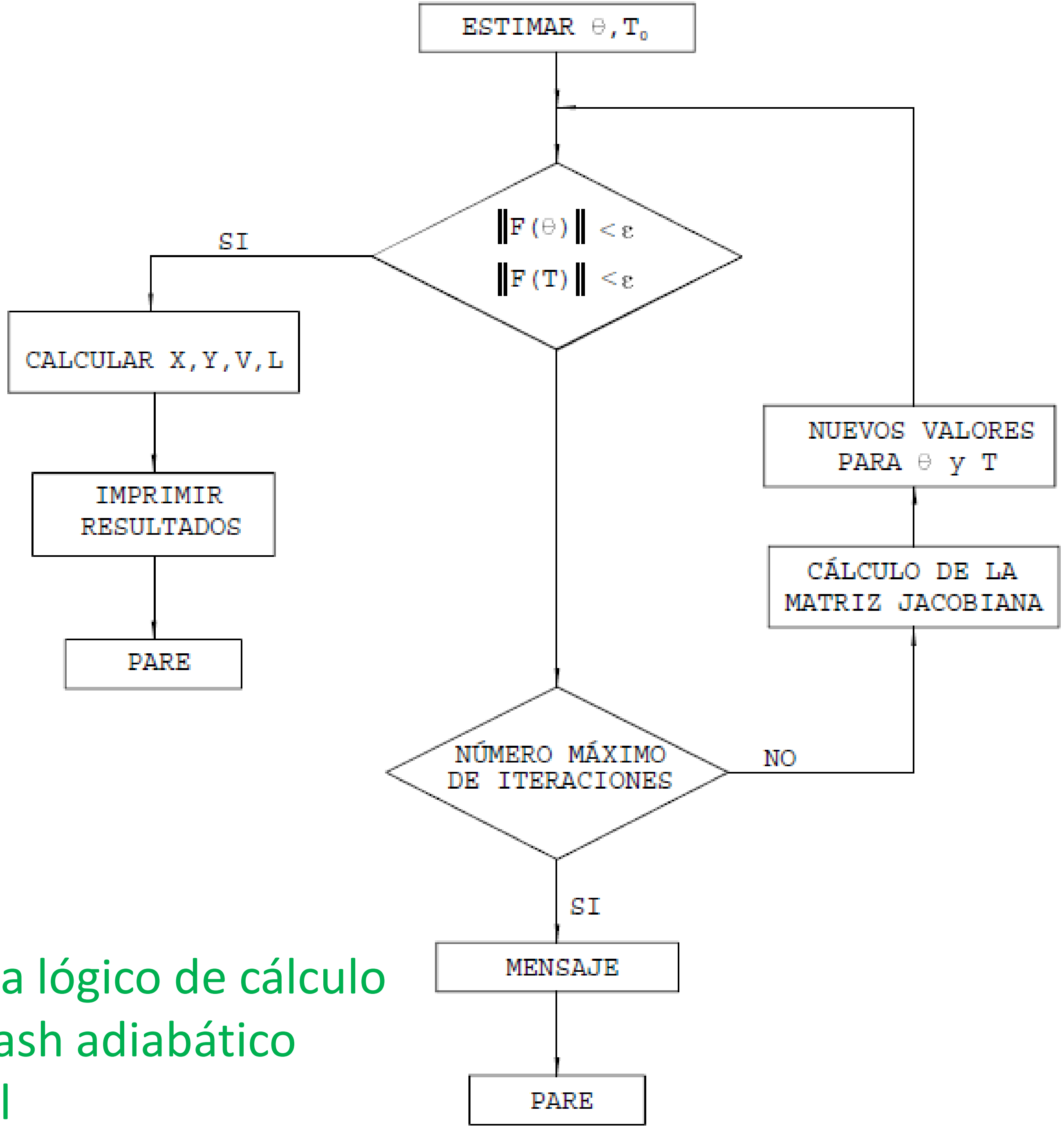
$$H_L = f\left(T^*, P, x\right)$$

$$H_V = f\left(T^*, P, y\right)$$

$$\left\| \begin{matrix} 1 - \theta^* \dfrac{H_V}{H_F} - \left(1 - \theta^*\right)\dfrac{H_L}{H_F} \\ \displaystyle\sum_i \frac{\left(K_i - 1\right) z_i}{\theta^*\left(K_i - 1\right) + 1} \end{matrix} \right\| \le tol$$

Propongo un nuevo par θ* y T*

¡Balance de energía acoplado!



Esquema lógico de cálculo de un flash adiabático

Eq. ideal

Resolución secuencial (flash adiabático eq. ideal)

$$K_i = f_{ideal}\left(T^*, P\right) \qquad \forall i$$ T*

$$\sum_i \frac{\left(K_i - 1\right) z_i}{\theta\left(K_i - 1\right) + 1} = 0 \qquad \to \theta$$ (método iterativo)

$$x_i = \frac{z_i}{\theta\left(K_i - 1\right) + 1}$$

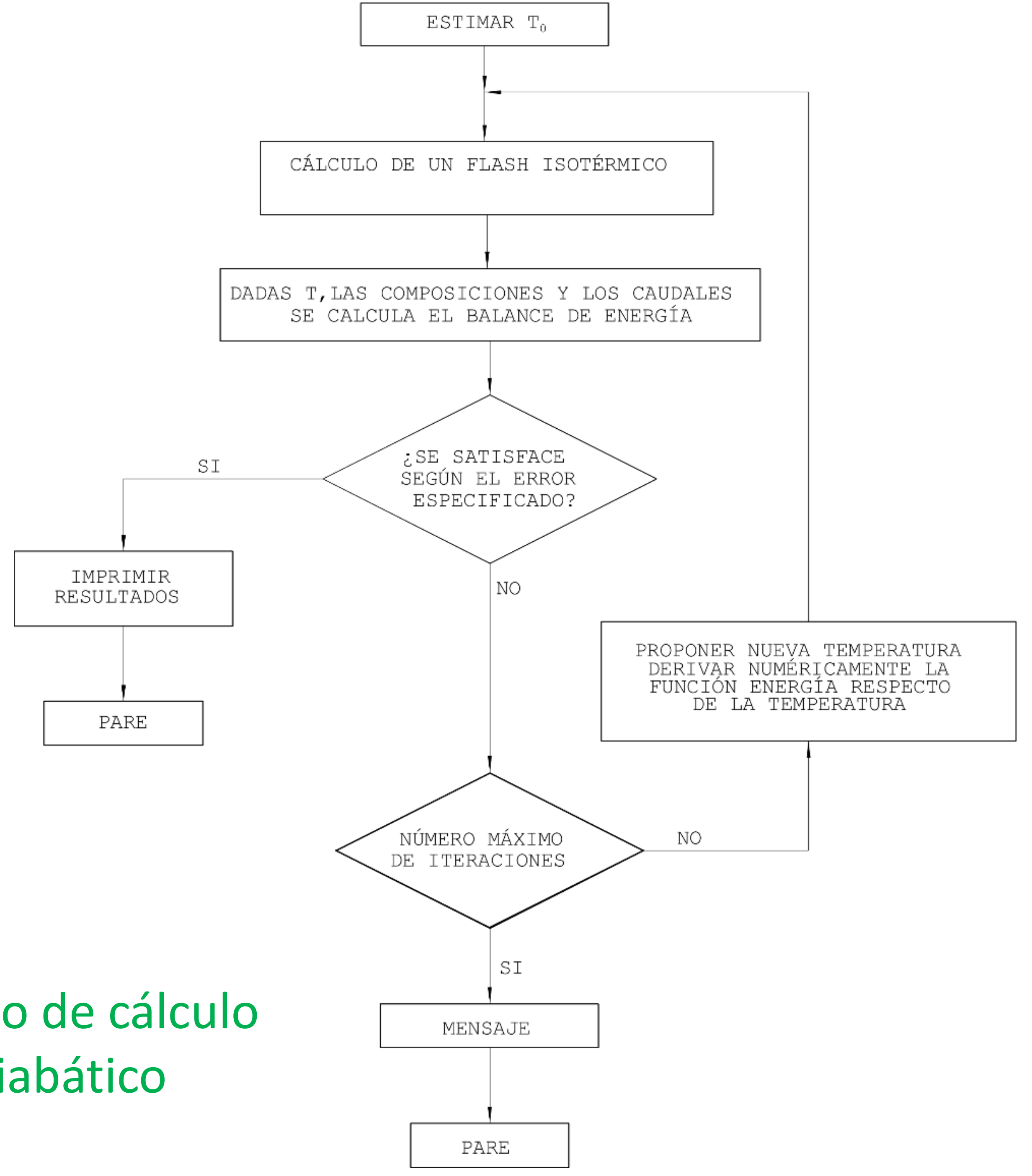
$$y_i = K_i x_i \qquad \forall i$$

$$H_L = f\left(T^*, P, x\right)$$

$$H_V = f\left(T^*, P, y\right)$$

$$\left\| 1 - \theta \frac{H_V}{H_F} - \left(1 - \theta\right) \frac{H_L}{H_F} \right\| \leq tol$$ Propongo un nuevo T*

¡Balance de energía acoplado!



Esquema lógico de cálculo
de un flash adiabático
Eq. ideal

Resolución simultanea (flash adiabático eq. No ideal)

$$x^{\#}, y^{\#}$$

$x^{\#}$ e $y^{\#}$

$$K_i = f\left(T^*, P, x^{\#}, y^{\#}\right) \quad \forall i$$

θ* y T*

$$x_i = \frac{z_i}{\theta^*\left(K_i - 1\right) + 1} \qquad y_i = K_i x_i \qquad \forall i$$

$$H_L = f\left(T^*, P, x\right) \qquad H_V = f\left(T^*, P, y\right)$$

$$\left\| \begin{matrix} 1 - \theta^* \dfrac{H_V}{H_F} - \left(1 - \theta^*\right)\dfrac{H_L}{H_F} \\ \displaystyle\sum_i \frac{\left(K_i - 1\right) z_i}{\theta^*\left(K_i - 1\right) + 1} \end{matrix} \right\| \leq tol$$

Propongo un nuevo par θ* y T*

$$\left\| x - x^{\#} \right\| \leq \varepsilon$$

$$\left\| y - y^{\#} \right\| \leq \varepsilon$$

Propongo un nuevo par $x^{\#}$ e $y^{\#}$

Resolución secuencial (flash adiabático eq. No ideal)

$$x^{\#}, y^{\#}$$

x# e *y*#

$$K_i = f\left(T^*, P, x^{\#}, y^{\#}\right) \quad \forall i$$

T*

$$\sum_i \frac{(K_i - 1) z_i}{\theta (K_i - 1) + 1} = 0 \qquad \rightarrow \theta$$

(método iterativo)

$$x_i = \frac{z_i}{\theta (K_i - 1) + 1} \qquad y_i = K_i x_i \qquad \forall i$$

$$H_L = f\left(T^*, P, x\right) \quad H_V = f\left(T^*, P, y\right)$$

$$\left\| 1 - \theta \frac{H_V}{H_F} - (1 - \theta) \frac{H_L}{H_F} \right\| \le tol$$

Propongo un nuevo T*

$$\left\| x - x^{\#} \right\| \le \varepsilon$$

$$\left\| y - y^{\#} \right\| \le \varepsilon$$

Propongo un nuevo par *x*# e *y*#

Flash a calor intercambiado dado (Conozco *P* y Q)

$$FH_F - F\theta H_V - LH_L + Q = 0$$

$$FH_F - F\theta H_V - F\left(1-\theta\right)H_L + Q = 0$$

$$H_F - \theta H_V - \left(1-\theta\right)H_L + \frac{Q}{F} = 0$$

$$1-\theta\frac{H_V}{H_F} - \left(1-\theta\right)\frac{H_L}{H_F} + \frac{Q}{FH_F} = 0$$

$$\sum_i \frac{\left(K_i - 1\right)z_i}{\theta\left(K_i - 1\right)+1} = 0$$

Se resuelve igual que para *Q*=0 pero considerando *Q* en el balance de energía.

Flash a fracción de vaporización dada (θ y P)

$$z_i - \theta K_i x_i - (1-\theta) x_i = 0 \qquad \forall i$$

$$\sum_i \frac{(K_i - 1) z_i}{\theta (K_i - 1) + 1} = 0$$

$$1 - \theta \frac{H_V}{H_F} - (1-\theta) \frac{H_L}{H_F} + \frac{Q}{F H_F} = 0$$

$$x_i = \frac{z_i}{\theta (K_i - 1) + 1} \qquad \forall i$$

$$K_i = f(T, P, x, y) \qquad \forall i$$

$$y_i = K_i x_i \qquad \forall i$$

$$H_V = f(T, P, y)$$

$$H_L = f(T, P, x)$$

Proponer una secuencia de resolución para eq. Ideal y otra para no Ideal.

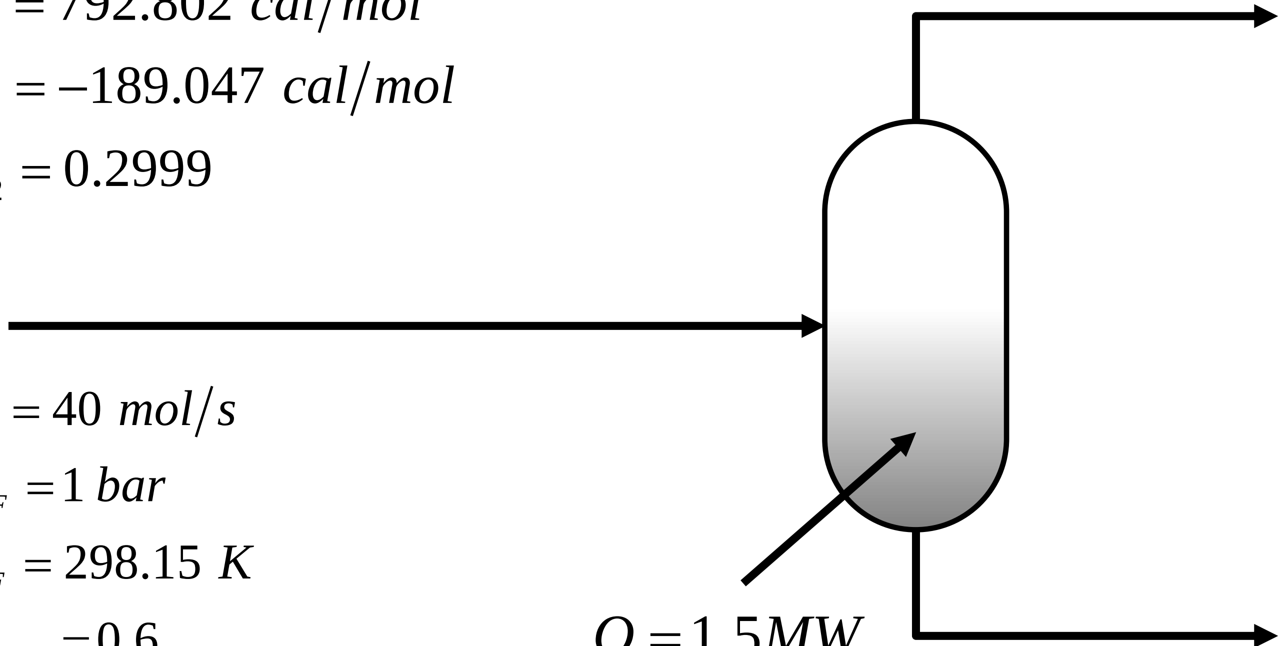
Ejemplo: NRTL – Fase Vapor ideal

NRTL

$a_{12} = 792.802\ cal/mol$

$a_{21} = -189.047\ cal/mol$

$\alpha_{12} = 0.2999$



$F = 40\ mol/s$

$P_F = 1\ bar$

$T_F = 298.15\ K$

$z_{agua} = 0.6$

$z_{MeOH} = 0.4$

$Q = 1.5 MW$

$V =$

$P_V = 1\ bar$

$T_V =$

$y_{agua} =$

$y_{MeOH} =$

$L =$

$P_L = 1\ bar$

$T_L =$

$x_{agua} =$

$x_{MeOH} =$

Recordatorios

- Existen numerosas variantes de especificaciones para el equipo flash.
- Cada especificación tiene varias estrategias de resolución.
- Aquí solo se presentaron algunos casos habituales.

Temperatura de Burbuja (Conozco θ y P)

$$\lim_{\boxed{\theta \to 0}} \left\{ \sum_i \frac{(K_i - 1) z_i}{\theta (K_i - 1) + 1} \right\} = 0$$

¿?

$$\sum_i (K_i - 1) z_i = 0 \quad \rightarrow \sum_i z_i K_i - 1 = 0$$

$$\boxed{\sum_i z_i K_i = 1}$$

Si se especifica θ y T se calcula la presión de burbuja

Proponer una estrategia

Temperatura de Rocío (Conozco θ y P)

$$\lim_{\boxed{\theta\to 1}}\left\{\sum_i \frac{(K_i-1)z_i}{\theta(K_i-1)+1}\right\}=0$$

¿?

$$\sum_i \frac{(K_i-1)z_i}{(K_i-1)+1}=0 \quad \to \sum_i \frac{(K_i-1)z_i}{K_i}=0 \to \sum_i z_i-\frac{z_i}{K_i}=0$$

$$\boxed{\sum_i \frac{z_i}{K_i}=1}$$

Si se especifica θ y T se calcula la presión de rocío

Proponer una estrategia

Resolución de un problema de VLE mediante un flash teórico

- Las estrategias presentadas para la resolución de separadores FLASH son ampliamente utilizadas en el calculo de propiedades termodinámicas.
- Anteriormente se presentaron diferentes modelos (compresor, bomba, intercambiador, etc) en los que asumimos que no se producía un cambio de fase o en su defecto, que conocíamos la fase (única) de la corriente.
- La existencia de una única fase homogénea (líquido o vapor) facilita los cálculos (en el repaso fisicoquímico mostramos como obtener las propiedades de una mezcla líquida o gaseosa).
- Por lo tanto, para una única fase la ecuación constitutiva de una propiedad termodinámica resulta sencilla de resolver.

Ejemplo: Ecuación constitutiva de la entalpía (única fase).

Si la corriente es un líquido:

$$f\left(H,T,P,x\right)=0 \;\rightarrow H = f_L\left(T,P,x\right)$$

- Se utiliza alguna ecuación algebraica correspondiente a la fase líquida y por lo general son explícitas en la entalpía.
- La composición global de la mezcla corresponde a la de la fase.

Si la corriente es un vapor (o gas):

$$f\left(H,T,P,x\right)=0 \;\rightarrow H = f_V\left(T,P,x\right)$$

- Se utiliza alguna ecuación algebraica correspondiente a la fase vapor y por lo general son explícitas en la entalpía.
- La composición global de la mezcla corresponde a la de la fase.

Resolución de un problema de VLE mediante un flash teórico

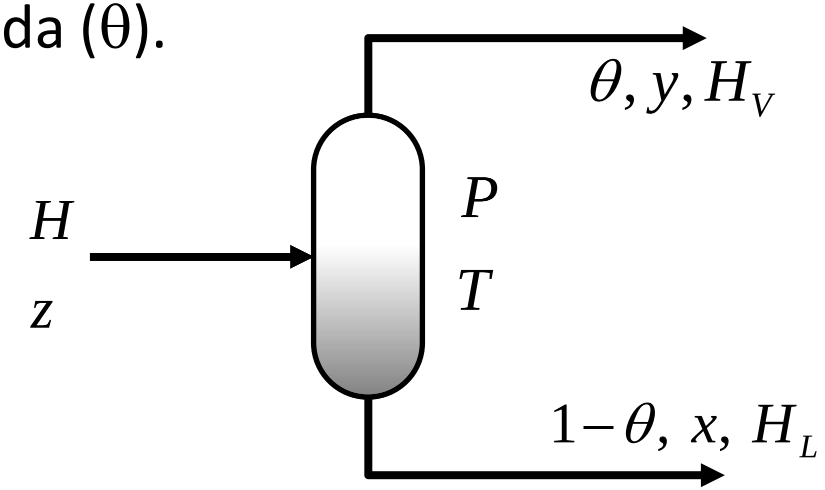
- Si la corriente del proceso se encuentra en equilibrio líquido-vapor, para poder conocer sus propiedades debemos resolver un problema de equilibrio. Por lo tanto, se somete la corriente a un FLASH teórico adiabático.
- Por ejemplo, recordamos la ecuación constitutiva de la entalpía:

  $$f\left(H, T, P, x\right) = 0$$

  Donde *H* es la entalpía (total), *T* la temperatura, *P* la presión y *x* la composición (global) de la mezcla.
- Sin embargo, al existir ahora dos fases en equilibrio, cada una de las fases tendrá su propia composición y entalpía. Pero la cantidad relativa de cada una de ellas (fracción vaporizada) deberá satisfacer los balances de materia y energía.

Ejemplo: Ecuación constitutiva de la entalpía (VLE).

- Para mayor comodidad cambiamos la nomenclatura de la composición global de la mezcla:
  $$f\left(H,T,P,x\right)=0 \rightarrow f\left(H,T,P,z\right)=0$$
- El flash teórico adiabático está alimentado por una corriente unitaria de entalpía H, composición z y opera a una presión P y temperatura T. Todas estas propiedades (H,T,P,z) corresponden a las de la corriente.
- Aparece entonces una nueva propiedad de la corriente que es la fracción vaporizada (θ).

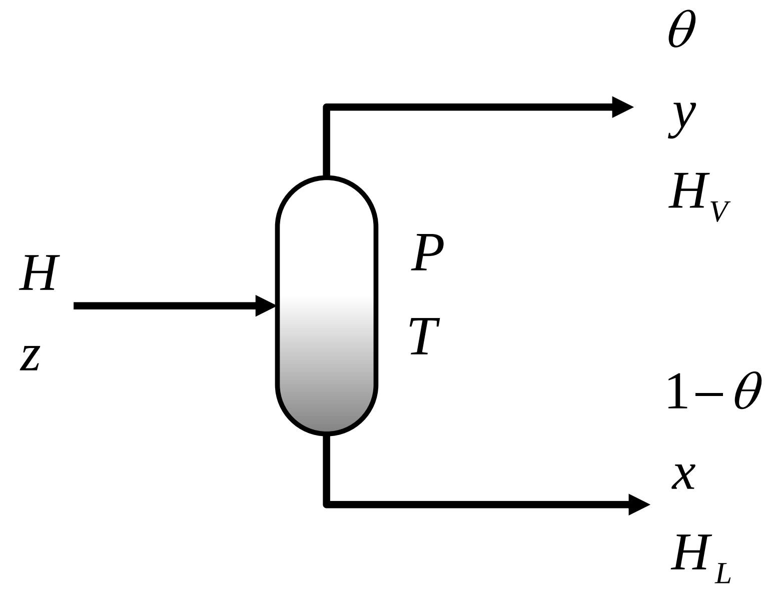


Ejemplo: Ecuación constitutiva de la entalpía (VLE).

- Un FLASH modular secuencial tiene **dos grados** de libertad, luego, al ser adiabático los grados de libertad caen a **uno**.
- Sin embargo, si consideramos como incógnita la entalpía de la corriente de entrada (*H*) los grados de libertad vuelven a ser **dos**.
- La composición de entrada (global de la corriente, *z*) siempre es conocida ya que se obtiene del balance de materia del equipo en cuestión.

$$1-\theta\frac{H_V}{H}-\left(1-\theta\right)\frac{H_L}{H}=0$$

$$\sum_i \frac{\left(K_i-1\right)z_i}{\theta\left(K_i-1\right)+1}=0$$



FLASH PH

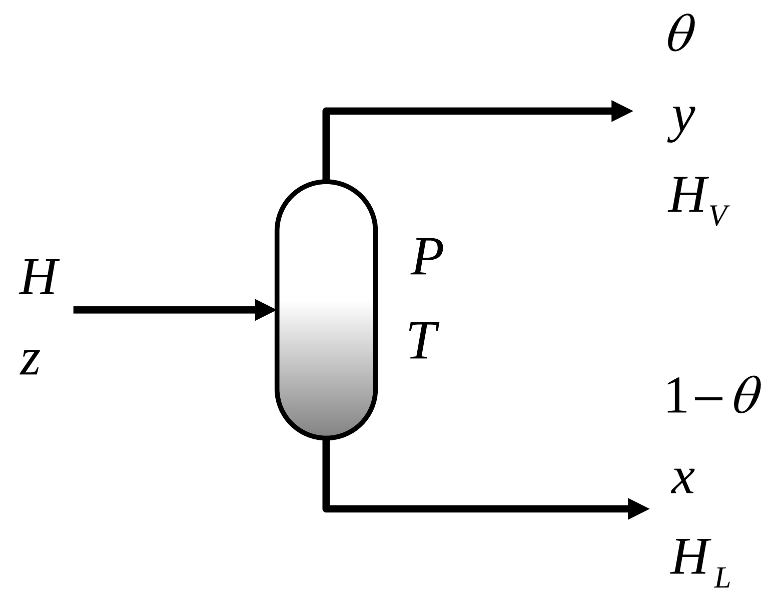
<u>Caso 1: Conozco la presión P y entalpía H de la mezcla</u>

Se resuelve el Flash adiabático y se obtiene como resultado la temperatura de la corriente T y su fracción vaporizada θ. Este problema se conoce como FLASH PH.

$$f\left(H, T, P, z\right) = 0 \;\rightarrow FLASH_{PH}\left(H, P, z\right) \rightarrow T,\; \theta$$

$$1 - \theta \frac{H_V}{H} - \left(1-\theta\right)\frac{H_L}{H} = 0$$

$$\sum_i \frac{\left(K_i - 1\right) z_i}{\theta\left(K_i - 1\right) + 1} = 0$$

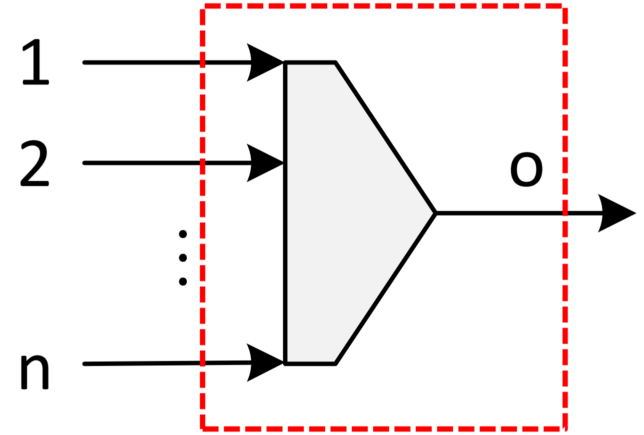


Ejemplo: Nodo sumador con cambio de fase (salida en equilibrio)

$$\sum_{k=1}^{n} m_k x_{k,i} - m_o x_{o,i} = 0 \quad \forall i$$

$$\sum_{i} x_{o,i} = 1$$

$$\sum_{k=1}^{n} m_k H_k - m_o H_o = 0$$



$m_o \;\; x_{o,i} \;\; T_o \;\; H_o$

$$f\left(H_o, T_o, P_o, x_o\right) = 0$$

Debemos resolver un flash teórico porque la corriente de salida presenta dos fases

0 Grados de libertad

Resolución secuencial

$$m_o = \sum_{k=1}^{n} m_k \quad 1$$

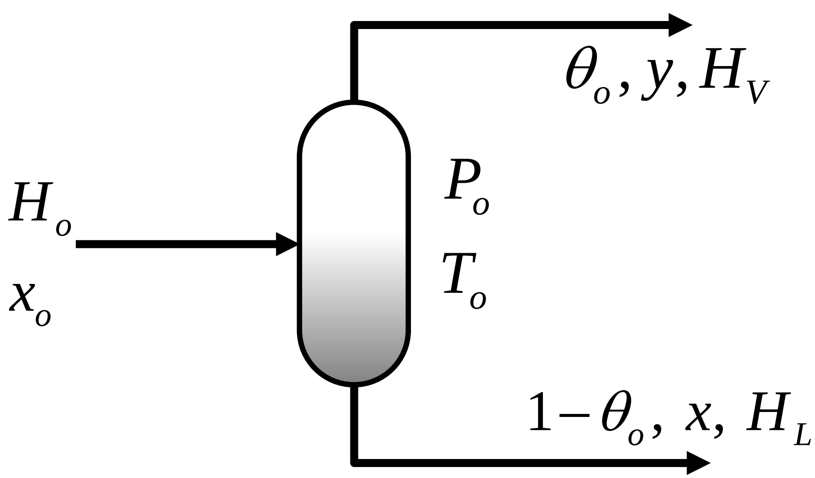
$$x_{o,i} = \frac{\sum_{k=1}^{n} m_k x_{k,i}}{m_o} \qquad \forall i \quad 2$$

$$H_o = \frac{\sum_{k=1}^{n} m_k H_k}{m_o} \quad 3$$

Resolución secuencial

$$f\left(H_o, T_o, P_o, x_o\right) = 0 \;\rightarrow FLASH_{PH}\left(H_o, P_o, x_o\right) \rightarrow T_o,\; \theta_o \qquad 4$$

- A diferencia del modelo presentado anteriormente (sin cambio de fase), en el ultimo paso se debió recurrir a un flash teórico para poder conocer la temperatura de la corriente.



$$1-\theta_o \frac{H_V}{H_o} - \left(1-\theta_o\right)\frac{H_L}{H_o} = 0$$

$$\sum_i \frac{\left(K_i - 1\right) x_{o,i}}{\theta_o\left(K_i - 1\right) + 1} = 0$$

Resolución del FLASH PH teórico (VLE ideal)

$$f\left(H_o,T_o,P_o,x_o\right)=0\rightarrow FLASH_{PH}\left(H_o,P_o,x_o\right)\rightarrow T_o,\ \theta_o$$

5

$$K_i = f_{ideal}\left(T_o^*,P_o\right) \qquad \forall i$$

T_o*

$$\sum_i \frac{\left(K_i-1\right)x_{o.i}}{\theta_o\left(K_i-1\right)+1}=0 \quad \rightarrow \theta_o$$

(método iterativo)

$$x_i = \frac{x_{o,i}}{\theta_o\left(K_i-1\right)+1} \qquad y_i = K_i x_i \qquad \forall i$$

$$H_L = f\left(T_o^*,P_o,x\right) \qquad H_V = f\left(T_o^*,P_o,y\right)$$

$$\left\|1-\theta_o\frac{H_V}{H_o}-\left(1-\theta_o\right)\frac{H_L}{H_o}\right\|\le tol$$

Propongo un nuevo T_o*

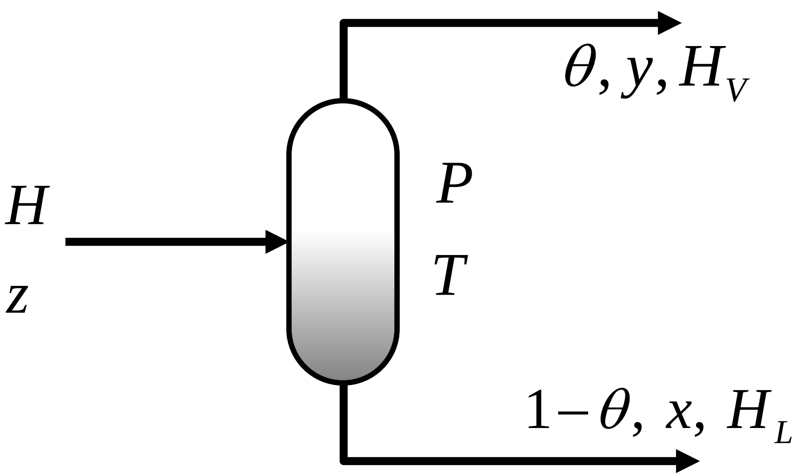
Plantear resolución con VLE no ideal

FLASH PT

Caso 2: Conozco P y T

Se resuelve un Flash isotérmico y se obtiene como resultado la entalpía de la corriente H y su fracción vaporizada θ. Este problema se conoce como FLASH PT.

$$f\left(H, T, P, z\right) = 0 \;\rightarrow FLASH_{PT}\left(T, P, z\right) \rightarrow H,\; \theta$$



$$\sum_i \frac{\left(K_i - 1\right) z_i}{\theta\left(K_i - 1\right) + 1} = 0$$

$$H = \theta H_V + \left(1 - \theta\right) H_L$$

¡El balance de energía esta desacoplado!

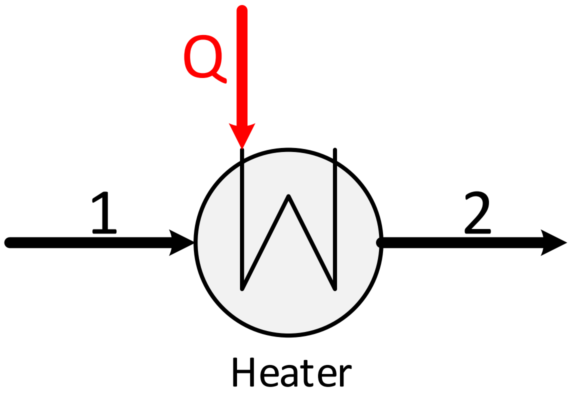
¡Cuidado con compuesto puros!

Ejemplo: Heater con cambio de fase (salida en equilibrio)

$$m_1 x_{1,i} - m_2 x_{2,i} = 0 \qquad \forall i$$

$$\sum_i x_{2,i} = 1$$

$$m_1 H_1 + Q - m_2 H_2 = 0$$



$$f\left(H_2, T_2, P_2, x_2\right) = 0$$

Debemos resolver un flash teórico porque la corriente de salida presenta dos fases

Caso 1:

- Presión de salida.
- Temperatura de salida

$m_2 \quad x_{2,i} \quad T_2 \quad P_2 \quad H_2 \quad Q$

2 Grados de libertad

Resolución secuencial

$$m_2 = m_1$$ 1

$$x_{2,i} = x_{2,i} \qquad \forall i$$ 2

$$f\left(H_2, T_2, P_2, x_2\right) = 0 \;\rightarrow FLASH_{PT}\left(T_2, P_2, x_2\right) \rightarrow H_2,\ \theta_2$$ 3

$$Q = m_2 H_2 - m_1 H_1$$ 4

Resolución del FLASH PT teórico (VLE ideal)

$$f\left(H_2, T_2, P_2, x_2\right) = 0 \rightarrow FLASH_{PT}\left(T_2, P_2, x_2\right) \rightarrow H_2,\ \theta_2$$

$$K_i = f_{ideal}\left(T_2, P_2\right) \qquad \forall i$$

$$\sum_i \frac{\left(K_i - 1\right) x_{2,i}}{\theta_2\left(K_i - 1\right) + 1} = 0 \quad \rightarrow \theta_2$$

(método iterativo)

$$x_i = \frac{x_{2,i}}{\theta_2\left(K_i - 1\right) + 1} \qquad y_i = K_i x_i \qquad \forall i$$

$$H_L = f\left(T_2, P_2, x\right) \qquad H_V = f\left(T_2, P_2, y\right)$$

$$H_2 = \theta_2 H_V + \left(1 - \theta_2\right) H_L$$

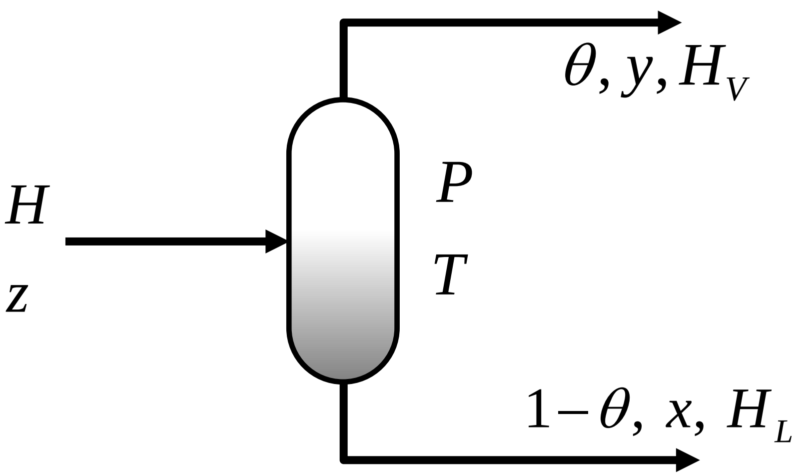
Plantear resolución para VLE no ideal

FLASH Pθ

<u>Caso 3: Conozco P y θ</u>

Se resuelve un Flash a presión (P) y fracción vaporizada (θ) conocida. Como resultado se obtiene la temperatura de la corriente T y la entalpía H. Este problema se conoce como FLASH Pθ.

$$f\left(H, T, P, z\right) = 0 \;\rightarrow FLASH_{P\theta}\left(P, \theta, z\right) \rightarrow T,\; H$$



$$\sum_i \frac{\left(K_i - 1\right) z_i}{\theta\left(K_i - 1\right) + 1} = 0$$

$$H = \theta H_V + \left(1 - \theta\right) H_L$$

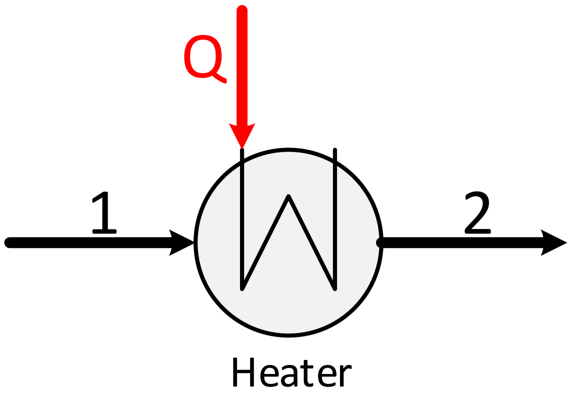
¡El balance de energía esta desacoplado!

Ejemplo: Heater con salida de fracción vaporizada conocida

$$m_1 x_{1,i} - m_2 x_{2,i} = 0 \qquad \forall i$$

$$\sum_i x_{2,i} = 1$$

$$m_1 H_1 + Q - m_2 H_2 = 0$$



$$f\left(H_2, T_2, P_2, x_2\right) = 0$$

Debemos resolver un flash teórico porque la corriente de salida presenta dos fases

$$¿\theta_2?$$

$m_2 \quad x_{2,i} \quad T_2 \quad P_2 \quad H_2 \quad Q$

2 Grados de libertad

- Presión de salida.
- Fracción vaporizada de salida

Heater con cambio de fase (salida con fracción vaporizada conocida)

$$m_1 x_{1,i} - m_2 x_{2,i} = 0 \qquad \forall i$$

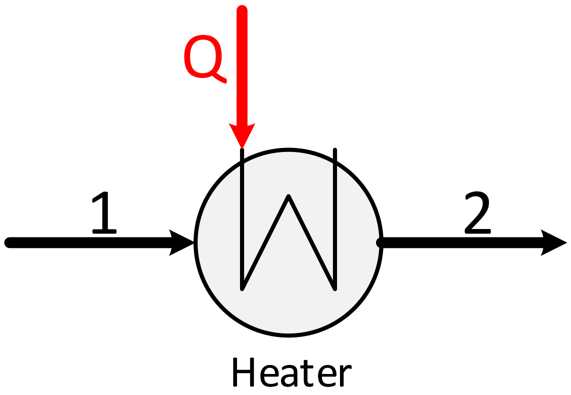
$$\sum_i x_{2,i} = 1$$

$$m_1 H_1 + Q - m_2 H_2 = 0$$

$$T_2 = FLASH_{P\theta}\left(P_2, \theta_2, x_2\right)$$

$$H_2 = FLASH_{P\theta}\left(P_2, \theta_2, x_2\right)$$

Reemplazamos por dos ecuaciones para mantener constantes los grados de libertad



$m_2 \quad x_{2,i} \quad T_2 \quad P_2 \quad H_2 \quad Q \quad \theta_2$

2 Grados de libertad

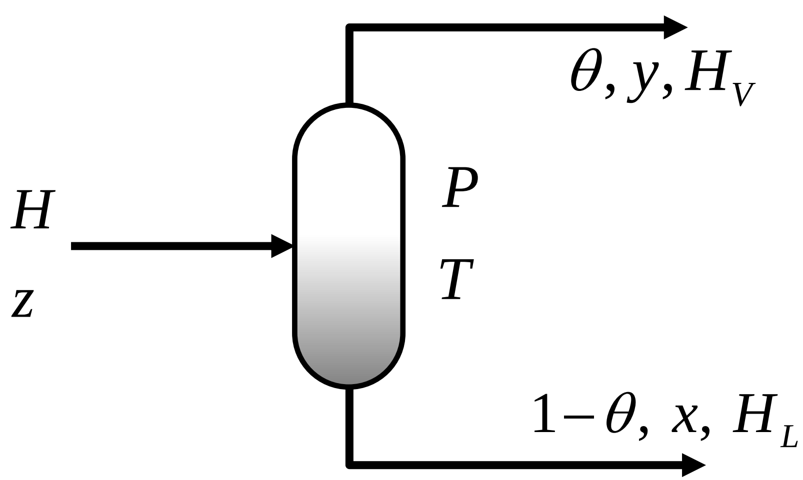
Plantear la secuencia de resolución

FLASH Tθ

<u>Caso 3: Conozco T y θ</u>

Se resuelve un Flash a temperatura (T) y fracción vaporizada (θ) conocida. Como resultado se obtiene la presión de la corriente P y la entalpía H. Este problema se conoce como FLASH Tθ.

$$f\left(H, T, P, z\right) = 0 \;\rightarrow FLASH_{T\theta}\left(T, \theta, z\right) \rightarrow P,\;\; H$$



$$\sum_i \frac{\left(K_i - 1\right) z_i}{\theta\left(K_i - 1\right) + 1} = 0$$

$$H = \theta H_V + \left(1 - \theta\right) H_L$$

¡El balance de energía esta desacoplado!

Ecuación constitutiva de la entalpía (VLE).

¡Importante!

- Pensar los casos restantes.
- Aplicar el mismo análisis para el calculo de la entropía.
- Proponer las secuencias de resolución faltantes.
- Pueden existir otros tipos de equilibrio (L-L, L-L-V, etc)

Corrientes con equilibrio de fases

¿Cómo sabemos la/s fase/s de una corriente?

- No es un problema trivial la predicción de fases.
- En general se debe conocer la composición global de la corriente y dos propiedades intensivas (P y T; P y H; T y H, etc..).
- En nuestros ejemplos sencillos donde solo consideramos equilibrio L-V de fluidos condensables podemos analizar el punto de rocío y burbuja de la mezcla para predecir las fases de una corriente (L, V o L-V).
- Remarcamos la conclusión acerca de la predicción (y estabilidad) de fases que figura en el manual de usuarios del simulador comercial HYSYS:

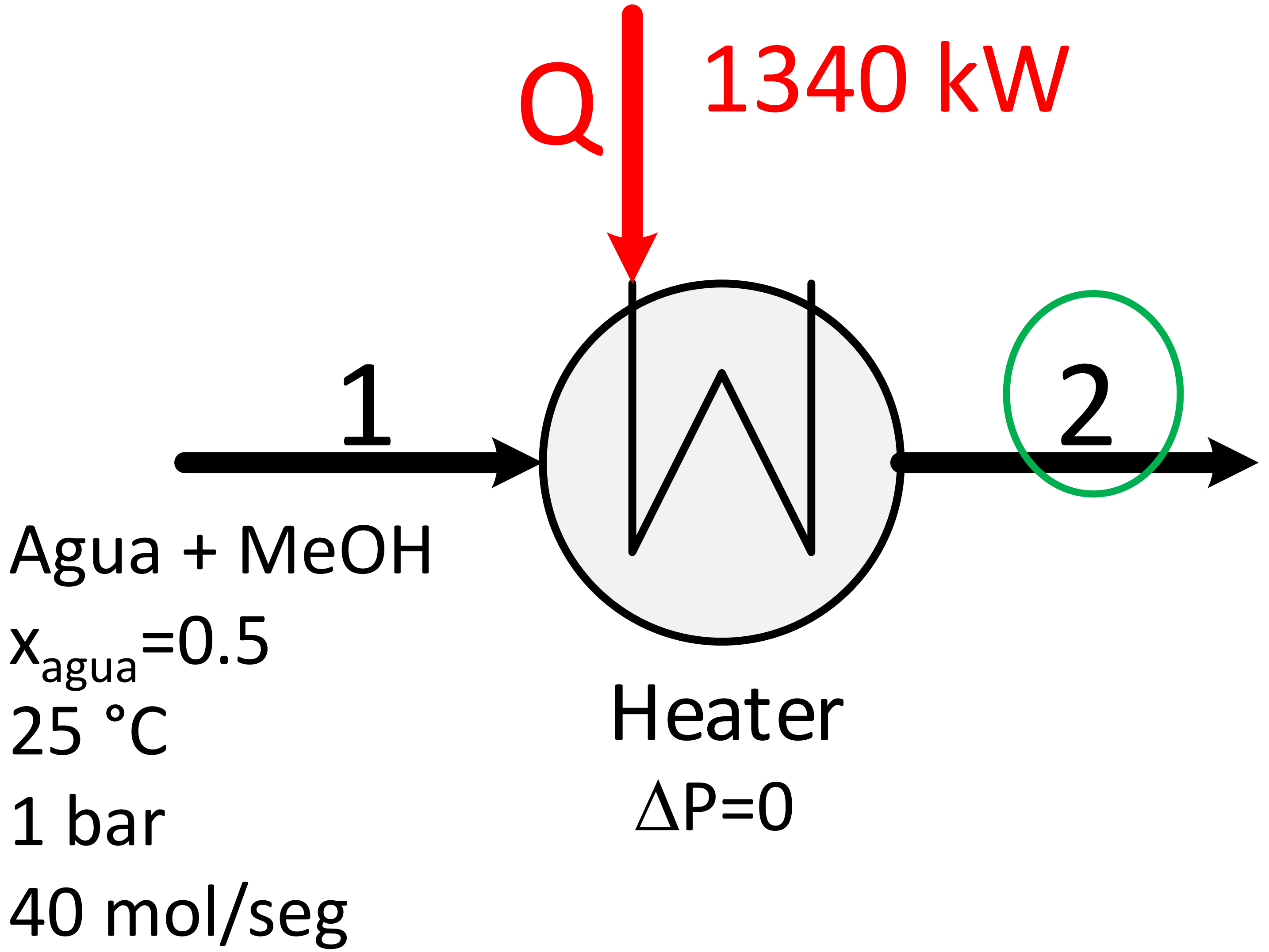
aspentech HYSYS

…is a blend of physics, empiricism and art.

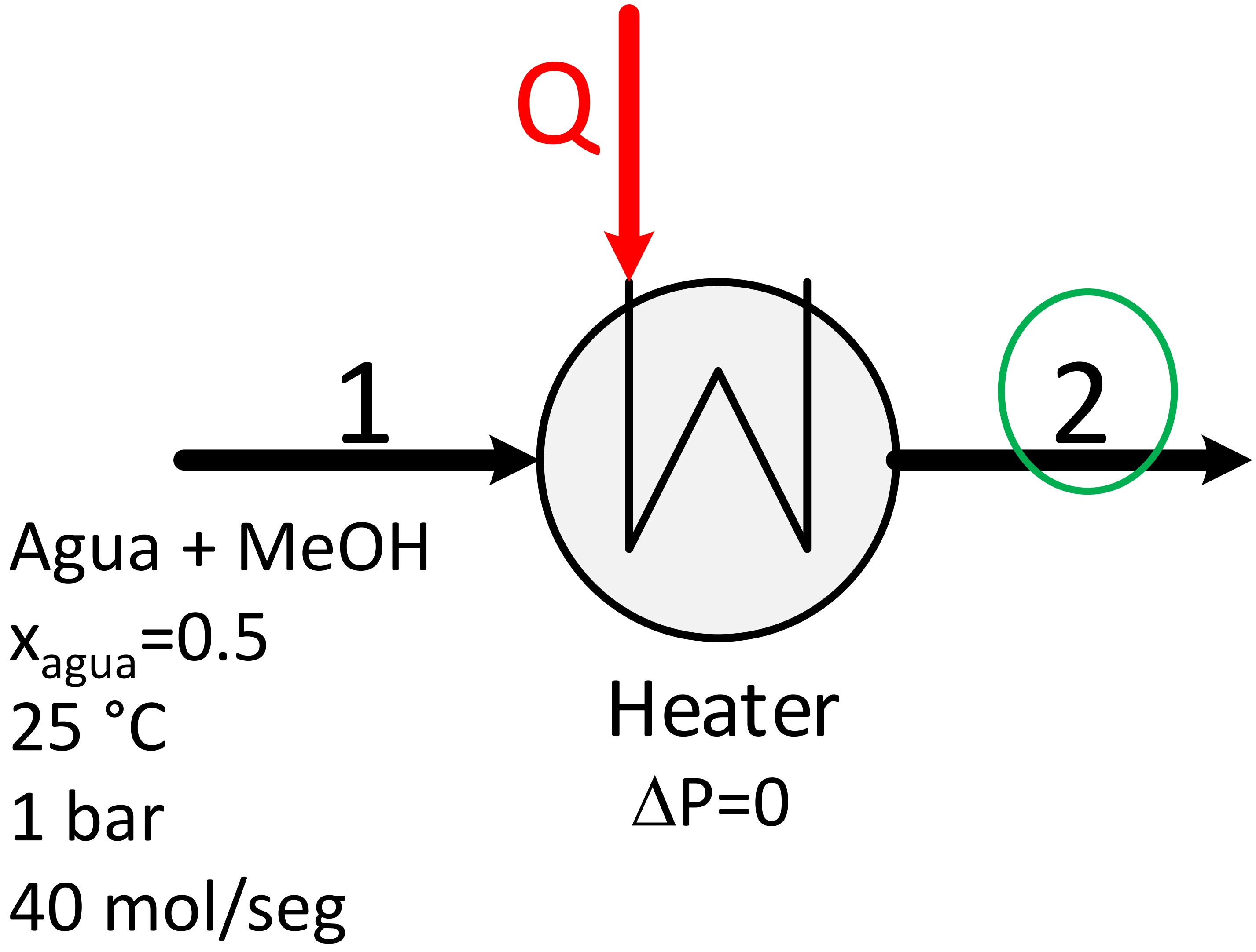
Conclusión

- Durante la secuencia de resolución de un equipo, cada vez que se deba resolver la ecuación constitutiva de una propiedad termodinámica, se deberá resolver un problema de estimación de fases utilizando las variables conocidas para cerrar los grados de libertad.
- Este no es un problema trivial y existen numerosos algoritmos y criterios para resolverlo.
- Cada simulador tiene diferentes estrategias programadas y en general el usuario puede seleccionar la que mas le convenga o caso contrario dejar la opción por defecto.

Ejemplo: Salida saturada



Ejemplo: Salida de vapor saturado



Ejemplo: Flash Isotérmico no ideal

$NRTL$

$a_{12} = 792.802\ cal/mol$

$a_{21} = -89.047\ cal/mol$

$\alpha_{12} = 0.2999$

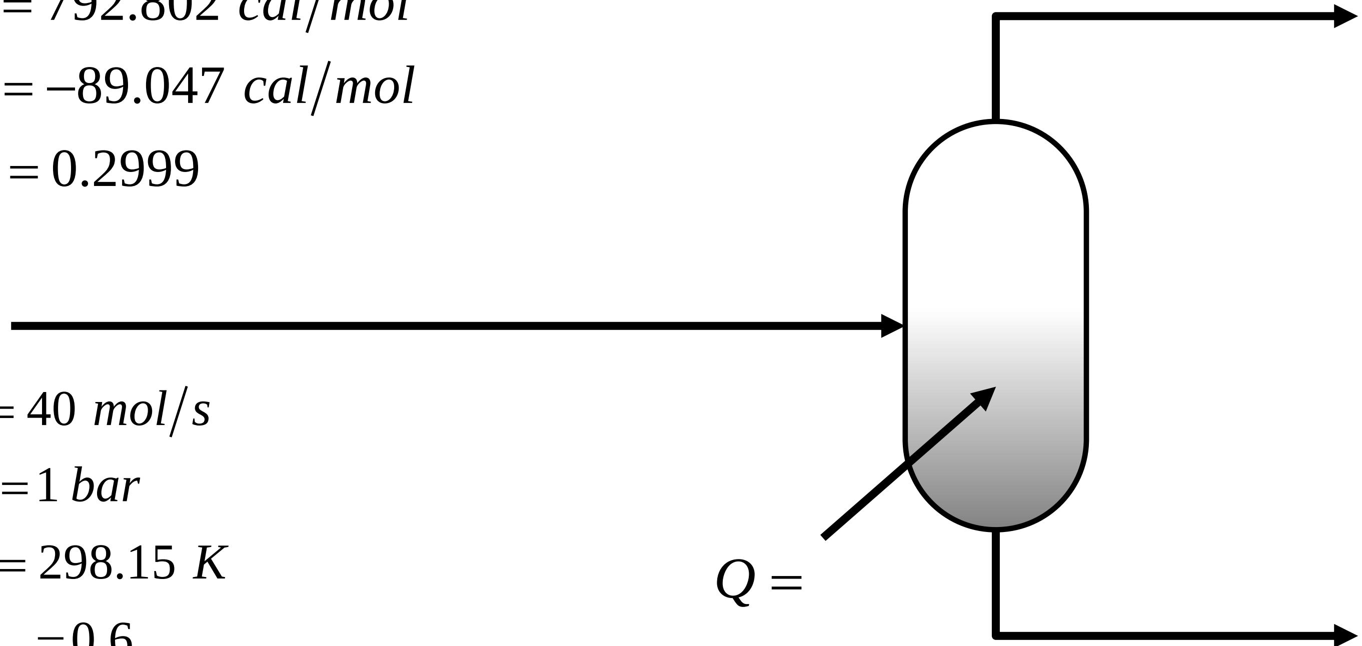
$F = 40\ mol/s$

$P_F = 1\ bar$

$T_F = 298.15\ K$

$z_{agua} = 0.6$

$z_{MeOH} = 0.4$



$Q =$

$V =$

$P_V = 1\ bar$

$T_V = 355\ K$

$y_{agua} =$

$y_{MeOH} =$

$L =$

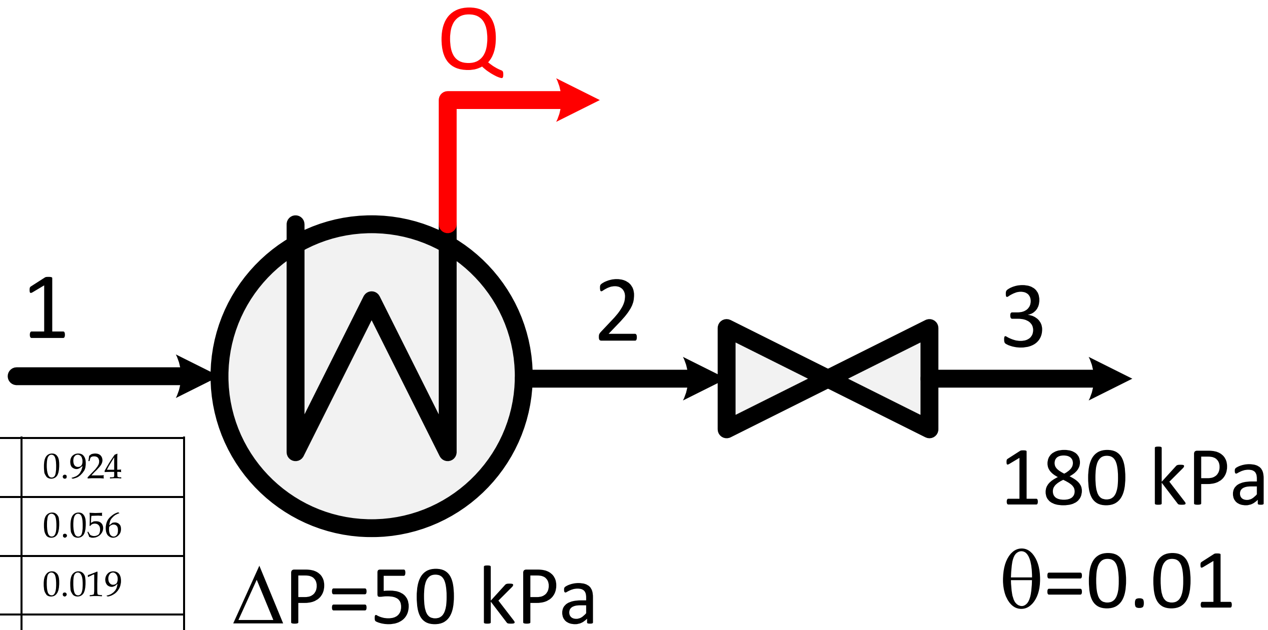
$P_L = 1\ bar$

$T_L = 355\ K$

$x_{agua} =$

$x_{MeOH} =$

Ejemplo: Salida saturada



Methane (% mol)	0.924
Ethane (% mol)	0.056
Propane (% mol)	0.019
n-Butane (% mol)	0.001
GN Inlet Temperature (°C)	15
GN Inlet Pressure (kPa)	6000