

**UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA NACIONAL - FACULTAD REGIONAL
ROSARIO**

Departamento de Ingeniería Química - Cátedra Integración IV

Modelado de equipos especiales: Cristalizadores

Cristalizador N°1

Hipótesis:

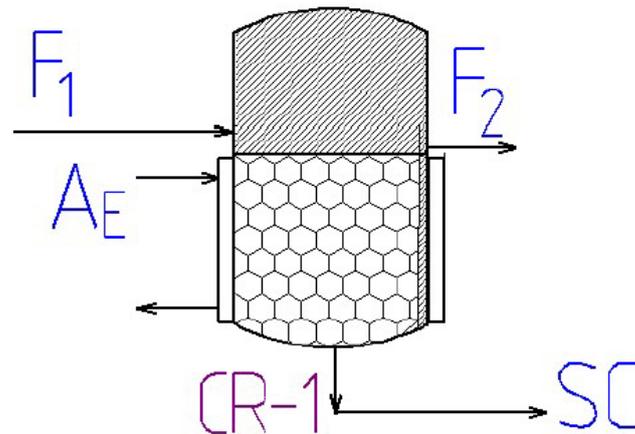
- La concentración límite de C en agua viene dada por una expresión en función de la temperatura T de la mezcla (C_c gramos de soluto por cada 100 g de agua) correlacionada a partir de datos experimentales (suponga que tiene validez para un gran rango de temperaturas):

$$C_c = f(T) = 0,00107 \times T^2 + 0,22268 \times T + 70,77336$$

- El cristalizador, refrigerado con agua de enfriamiento, tiene por objeto producir la sobresaturación de la mezcla.
- No hay reacciones químicas.
- Por sobre el rebosadero sale la corriente de aguas madres, una parte se recircula y otra se purga.
- El cristal que abandona el fondo contiene 5 % en peso de agua.
- Considere que el calor específico de la solución se puede considerar independiente de la temperatura y se calcula de esta forma:

$$Cp_s = \sum_{i=1}^4 x_i \times Cp_i$$

donde cp_i es el calor específico del componente i (incluyendo al agua), y Cp_s : Cp de C en forma de cristal e igual al Cp del mismo componente en solución.



Resolución:

Con las hipótesis antedichas debemos en primer lugar calcular la temperatura de equilibrio. Esto puede realizarse por la simplificación de que el C_p de C tanto en solución como cristalizado es el mismo.

Por la corriente F_1 ingresan los 4 componentes en solución (A, B, C y W), por la F_2 salen los mismos componentes en solución mientras que por SC sale una corriente de dos fases, cristal (C) y una solución de aguas madres (igual composición que F_2).

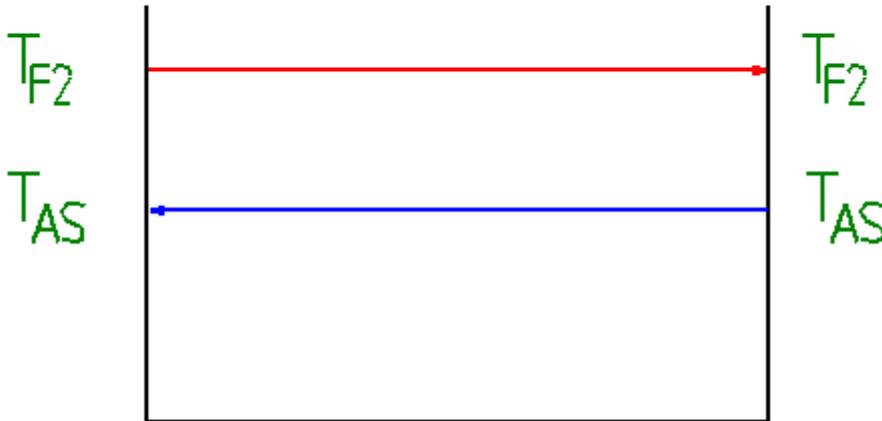
La corriente F_1 al enfriarse se sobresaatura en C que precipita. Para el cálculo podemos separar el proceso en 3: enfriamiento de la solución, precipitación y separación.

$$BE) \quad Q = F_1 \times C_{p_{F_1}} (T_{F_1} - T_{F_2})$$

$$Q = AE \times C_{p_{AE}} (T_{AS} - T_{AE})$$

$$Q = UA \times (T_{F_2} - T_{AS})$$

Por ser mezcla completa tanto en el tanque como en su camisa los perfiles de temperatura esperados son:



Donde:

$$Cp_{F1} = \sum_{i=1}^4 x_i \times Cp_i$$

Ya que se asume que el CP no varia nos queda un sistema de 3 ecuaciones con 3 incógnitas que puede reducirse a 2:

1) Enfriamiento

$$F_1 \times Cp_{F1} \times (T_{F1} - T_{F2}) = AE \times Cp_{AE} \times (T_{AS} - T_{AE})$$

$$AE \times Cp_{AE} \times (T_{AS} - T_{AE}) = UA \times (T_{F2} - T_{AS})$$

Que operando se reduce a 1:

$$F_1 \times Cp_{F1} \times T_{F1} - F_1 \times Cp_{F1} \times T_{F2} = AE \times Cp_{AE} \times (T_{AS} - T_{AE})$$

$$F_1 \times Cp_{F1} \times T_{F2} = F_1 \times Cp_{F1} \times T_{F1} - AE \times Cp_{AE} \times (T_{AS} - T_{AE})$$

$$T_{F2} = \frac{F_1 \times Cp_{F1} \times T_{F1} - AE \times Cp_{AE} \times (T_{AS} - T_{AE})}{F_1 \times Cp_{F1}}$$

$$AE \times Cp_{AE} \times (T_{AS} - T_{AE}) = UA \times (T_{F2} - T_{AS})$$

Reemplazando en la anterior:

$$AE \times Cp_{AE} \times (T_{AS} - T_{AE}) = UA \times \left(\frac{F_1 \times Cp_{F1} \times T_{F1} - AE \times Cp_{AE} \times (T_{AS} - T_{AE})}{F_1 \times Cp_{F1}} - T_{AS} \right)$$

$$\frac{AE \times Cp_{AE} \times T_{AS} - AE \times Cp_{AE} \times T_{AE}}{UA} = \left(\frac{F_1 \times Cp_{F1} \times T_{F1} - AE \times Cp_{AE} \times T_{AS} + AE \times Cp_{AE} \times T_{AE}}{F_1 \times Cp_{F1}} - T_{AS} \right)$$

$$\frac{AE \times Cp_{AE} \times T_{AS}}{UA} - \frac{AE \times Cp_{AE} \times T_{AE}}{UA} = \frac{F_1 \times Cp_{F1} \times T_{F1}}{F_1 \times Cp_{F1}} - \frac{AE \times Cp_{AE} \times T_{AS}}{F_1 \times Cp_{F1}} + \frac{AE \times Cp_{AE} \times T_{AE}}{F_1 \times Cp_{F1}} - T_{AS}$$

$$\frac{AE \times Cp_{AE} \times T_{AS}}{UA} + \frac{AE \times Cp_{AE} \times T_{AS}}{F_1 \times Cp_{F1}} + T_{AS} = \frac{F_1 \times Cp_{F1} \times T_{F1}}{F_1 \times Cp_{F1}} + \frac{AE \times Cp_{AE} \times T_{AE}}{F_1 \times Cp_{F1}} + \frac{AE \times Cp_{AE} \times T_{AE}}{UA}$$

$$T_{AS} \left(\frac{AE \times Cp_{AE}}{UA} + \frac{AE \times Cp_{AE}}{F_1 \times Cp_{F1}} + 1 \right) = \frac{F_1 \times Cp_{F1} \times T_{F1}}{F_1 \times Cp_{F1}} + \frac{AE \times Cp_{AE} \times T_{AE}}{F_1 \times Cp_{F1}} + \frac{AE \times Cp_{AE} \times T_{AE}}{UA}$$

$$T_{AS} = \frac{\frac{F_1 \times Cp_{F1} \times T_{F1}}{F_1 \times Cp_{F1}} + \frac{AE \times Cp_{AE} \times T_{AE}}{F_1 \times Cp_{F1}} + \frac{AE \times Cp_{AE} \times T_{AE}}{UA}}{\left(\frac{AE \times Cp_{AE}}{UA} + \frac{AE \times Cp_{AE}}{F_1 \times Cp_{F1}} + 1 \right)}$$

Luego se puede calcular la otra temperatura:

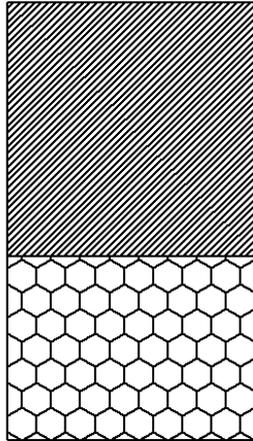
$$T_{F2} = \frac{F_1 \times Cp_{F1} \times T_{F1} - AE \times Cp_{AE} \times (T_{AS} - T_{AE})}{F_1 \times Cp_{F1}}$$

Y el calor intercambiado:

$$Q = AE \times Cp_{AE} (T_{AS} - T_{AE})$$

II) Precipitación

Obtenemos dos fases, una sólida de C cristal y una solución de A, B y C en W. La concentración de C está determinada por la curva de solubilidad. Supongamos que todo el volumen del equipo está ocupado por ambas fases.



De acuerdo a la curva de solubilidad por cada 100 gr de agua tenemos m_C gramos de C.

$$m_C = f(T_{F2})$$

Siendo que en la misma base temporal la cantidad másica de agua que entra es la misma que permanece en las aguas madres (no esta presente en los cristales):

$$m_W = F_1 \times x_w^{F1} \times 18$$

De ambas expresiones anteriores podemos calcular la cantidad de C que permanece en la solución mediante la aplicación de la regla de 3 simple.

$$\begin{array}{l} 100 \text{ gr de agua} \rightarrow \vdots m_C \text{ gr de C} \\ m_W \text{ gr de agua} \rightarrow \vdots m_{CS} = \frac{m_C \times m_W}{100} \end{array}$$

Es decir que del flujo de C que ingresa por unidad de tiempo m_{CS} quedan disueltos y el resto precipita:

$$m_{CC} = F_1 \times x_C^{F1} \times PM_C - m_{CS}$$

Resumiendo, tenemos dos fases, el cristal formado por C cuyo caudal es el anterior, y una solución que tiene los 4 componentes: 3 en igual cantidad que la ingresada (A, B y W) y el remanente de C. En moles:

$$\begin{aligned}
 A &= F_1 \times x_A^{F1} \\
 B &= F_1 \times x_B^{F1} \\
 C &= \frac{m_{CS}}{PM_C} \\
 W &= F_1 \times x_W^{F1}
 \end{aligned}$$

O expresado en fracciones molares:

$$M_T = F_1 \times x_A^{F1} + F_1 \times x_B^{F1} + \frac{m_{CS}}{PM_C} + F_1 \times x_W^{F1} = F_1 \times (x_A^{F1} + x_B^{F1} + x_W^{F1}) + \frac{m_{CS}}{PM_C}$$

$$\begin{aligned}
 x_A^{F2} &= \frac{F_1 \times x_A^{F1}}{M_T} \\
 x_B^{F2} &= \frac{F_1 \times x_B^{F1}}{M_T} \\
 x_C^{F2} &= \frac{\frac{m_{CS}}{PM_C}}{M_T} \\
 x_W^{F2} &= \frac{F_1 \times x_W^{F1}}{M_T}
 \end{aligned}$$

III) Separación

Si el componente C cristalizado abandonara seco la unidad el cálculo estaría terminado, no obstante, parte de las agua madres acompañan a los cristales en un 5 % en peso de agua. Para ello debe determinarse cuánto implica ese 5% de agua en los cristales y cuánto de A, B y C lo acompañan. Las aguas madres que salen con el cristal se descuentan de la corriente de solución remanente. El flujo molar de agua que acompaña al cristal es:

$$M_W^{CC} = \frac{0,05 \times (F_1 \times x_C^{F1} \times PM_C - m_{CS})}{18}$$

El flujo molar de agua en la corriente de aguas madres es la diferencia entre lo que entra y lo que acompaña al cristal:

$$W^{F2} = F_1 \times x_W^{F1} - M_W^{CC}$$

El flujo molar global es:

$$F_2 = \frac{W^{F2}}{x_W^{F2}}$$

Siendo la composición la misma ya que no sólo el agua acompaña al cristal sino también parte de A, B y C de la solución (aguas madres).

De este modo hemos calculado la temperatura de la mezcla, composición de la solución saturada de C, los flujos y composición de las corrientes de salida del cristalizador y la temperatura de salida del agua de enfriamiento.

Cristalizador N°2

Hipótesis:

- La concentración límite de C en agua viene dada por una expresión en función de la temperatura T de la mezcla (C_c gramos de soluto por cada 100 g de agua) correlacionada a partir de datos experimentales (suponga que tiene validez para un gran rango de temperaturas):

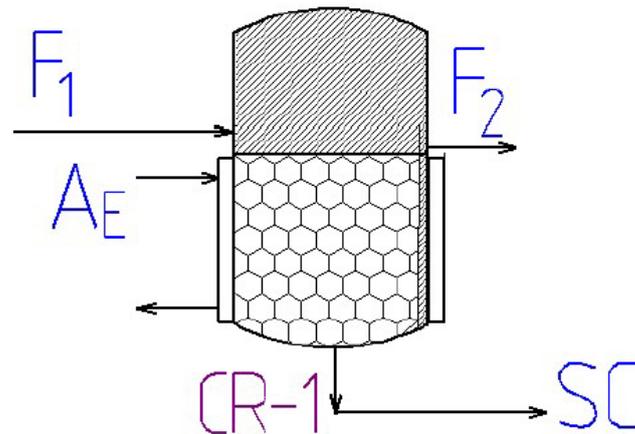
$$C_c = f(T) = 0,00107 \times T^2 + 0,22268 \times T + 70,77336$$

- El cristalizador, refrigerado con agua de enfriamiento, tiene por objeto producir la sobresaturación de la mezcla.
- No hay reacciones químicas.
- Por sobre el rebosadero sale la corriente de aguas madres, una parte se recircula y otra se purga.
- El cristal que abandona el fondo contiene 5 % en peso de agua.
- Considere que el calor específico de la solución se puede considerar independiente de la temperatura y se calcula de esta forma:

$$Cp_s = \sum_{i=1}^4 x_i \times Cp_i$$

donde cp_i es el calor específico del componente i (incluyendo al agua).

- **Cp de C en forma de cristal es diferente al Cp del mismo componente en solución.**



Considerando que el calor específico del componente C en la fase sólida difiere del calor específico de C en la fase líquida, la temperatura de salida no la podemos calcular directamente del balance de energía visto en el **Cristalizador N°1**. Para resolver este problema proseguiremos de la siguiente manera:

Balance de materia global: (en este punto se considera que el cristal sale seco del cristalizador)

$$(1) F_1 = F_2 + F_3$$

Balance de energía:

$$F_1 \times Cp_{F1} \times T_{F1} = F_2 \times Cp_{F2} \times T_{F2} + F_3 \times Cp_{CC} \times T_{F2} + Q$$

$$(2) Cp_{F1} = \sum_{i=1}^4 x_i^{F1} \times Cp_i$$

$$(3) Cp_{F2} = \sum_{i=1}^4 x_i^{F2} \times Cp_i$$

Cp_{CC} es dato.

Despejando T_{F2}

$$(4) T_{F2} = \frac{F_1 \times Cp_{F1} \times T_{F1} - Q}{F_2 \times Cp_{F2} + F_3 \times Cp_{CC}}$$

Donde

$$Q = AE \times Cp_{AE} (T_{AS} - T_{AE})$$

$$Q = UA \times (T_{F2} - T_{AS})$$

Trabajando con estas dos últimas ecuaciones, despejamos T_{AS} y Q

$$(5) \quad Q = \frac{UA \times AE \times Cp_{AE} (T_{F2} - T_{AE})}{UA + AE \times Cp_{AE}}$$

$$(6) \quad T_{AS} = T_{F2} - \frac{Q}{UA}$$

Resolución:

- 1- Estimamos una temperatura de salida T_{F2}^*
- 2- Con (5) y (6) calculamos Q y T_{AS}
- 3- Luego calculamos F_3 como en el caso del **Cristalizador N°1**:

De acuerdo a la curva de solubilidad por cada 100 gr de agua tenemos mc gramos de C.

$$m_C = f(T_{F2})$$

Siendo que en la misma base temporal la cantidad másica de agua que entra es la misma que permanece en las aguas madres (no esta presente en los cristales):

$$m_W = F_1 \times x_w^{F1} \times 18$$

De ambas expresiones anteriores podemos calcular la cantidad de C que permanece en la solución mediante la aplicación de la regla de 3 simple.

$$\begin{array}{l} 100 \text{ gr de agua} \rightarrow \vdots m_C \text{ gr de C} \\ m_W \text{ gr de agua} \rightarrow \vdots m_{CS} = \frac{m_C \times m_W}{100} \end{array}$$

Es decir que del flujo de C que ingresa por unidad de tiempo m_{CS} quedan disuelto y el resto precipita:

$$F_3 = F_1 \times x_C^{F1} - \frac{m_{CS}}{PM_C}$$

4- Con (1) calculamos F_2

5- Con m_{CS} podemos calcular las composiciones x_i^{F2} como sigue:

$$A = F_1 \times x_A^{F1}$$

$$B = F_1 \times x_B^{F1}$$

$$C = \frac{m_{CS}}{PM_C}$$

$$W = F_1 \times x_W^{F1}$$

O expresado en fracciones molares:

$$M_T = F_1 \times x_A^{F1} + F_1 \times x_B^{F1} + \frac{m_{CS}}{PM_C} + F_1 \times x_W^{F1} = F_1 \times (x_A^{F1} + x_B^{F1} + x_W^{F1}) + \frac{m_{CS}}{PM_C}$$

$$x_A^{F2} = \frac{F_1 \times x_A^{F1}}{M_T}$$

$$x_B^{F2} = \frac{F_1 \times x_B^{F1}}{M_T}$$

$$x_C^{F2} = \frac{\frac{m_{CS}}{PM_C}}{M_T}$$

$$x_W^{F2} = \frac{F_1 \times x_W^{F1}}{M_T}$$

6- Con x_i^{F2} podemos calcular el calor específico de la corriente F_2

$$Cp_{F2} = \sum_{i=1}^4 x_i^{F2} \times Cp_i$$

7- Ahora podemos calcular T_{F2} con (4).

8- ¿ $|T_{F2}^* - T_{F2}| < \epsilon$? \rightarrow Si \rightarrow voy al punto 9

→ No → Con el nuevo valor de T_{F2} vuelvo al punto 2

9- Una vez obtenida la temperatura de salida prosigo como en el ejemplo del **Cristalizador N°1**

Si el componente C cristalizado abandonara seco la unidad, el cálculo estaría terminado, no obstante, parte de las agua madres acompañan a los cristales en un 5 % en peso de agua. Para ello debe determinarse cuánto implica ese 5% de agua en los cristales y cuánto de A, B y C lo acompañan. Las aguas madres que salen con el cristal se descuentan de la corriente de solución remanente. El flujo molar de agua que acompaña al cristal es:

$$M_w^{CC} = \frac{0,05 \times (F_1 \times x_C^{F1} \times PM_C - m_{CS})}{18}$$

El flujo molar de agua en la corriente de aguas madres es la diferencia entre lo que entra y lo que acompaña al cristal:

$$W^{F2} = F_1 \times x_w^{F1} - M_w^{CC}$$

El flujo molar global es:

$$F_2 = \frac{W^{F2}}{x_w^{F2}}$$

Siendo la composición la misma ya que no sólo el agua acompaña al cristal sino también parte de A, B y C de la solución (aguas madres).

Este valor de F_2 representa la verdadera corriente de salida de las aguas madres. Con este valor volvemos a (1) y calculamos F_3 , la cual representa el cristal que está acompañado por un porcentaje de aguas madres.

De este modo hemos calculado la temperatura de la mezcla, composición de la solución saturada de C, los flujos y composición de las corrientes de salida del cristalizador y la temperatura de salida del agua de enfriamiento.