

Destilación: Índice

1. Introducción
2. Equilibrio Líquido-Vapor
 - Componente puro
 - Mezclas binarias
 - Mezclas ideales. Modelos termodinámicos
 - Mezclas reales. Modelos de coeficientes de actividad
3. Flash Isotermo
 - Cálculo del flash
 - Sistema de control del flash
4. Condiciones de Burbuja y Rocío
 - Cálculo presión punto de burbuja
 - Cálculo temperatura punto de burbuja
 - Cálculo temperatura punto de rocío
 - Cálculo presión punto de rocío

Destilación: Índice

5 Cálculo número de etapas de equilibrio de una columna de destilación para mezclas binarias: método de McCabe-Thiele

- Curva de equilibrio y volatilidad relativa
- Especificaciones requeridas
- Balances de materia
 - Línea de operación de la sección de reformation
 - Línea de operación de la sección de agotamiento
 - Condiciones de la alimentación: línea “q”
 - Desarrollo método gráfico
 - Determinación del mínimo número de etapas de equilibrio
 - Determinación de la relación de reflujo mínima
- Eficacia de Murphree

6 Sistemas de control

Destilación: Índice

- 7 Internos de las columnas
- 8 Diseño preliminar
 - Distancia entre platos
 - Capacidad de los platos
 - Condiciones de arrastre e inundación
 - Diámetro de la columna
- 9 Optimización económica

Destilación: Índice

1. Introducción

2. Equilibrio Líquido-Vapor

- Componente puro
- Mezclas binarias
 - Mezclas ideales. Modelos termodinámicos
 - Mezclas reales. Modelos de coeficientes de actividad

3. Flash Isotermo

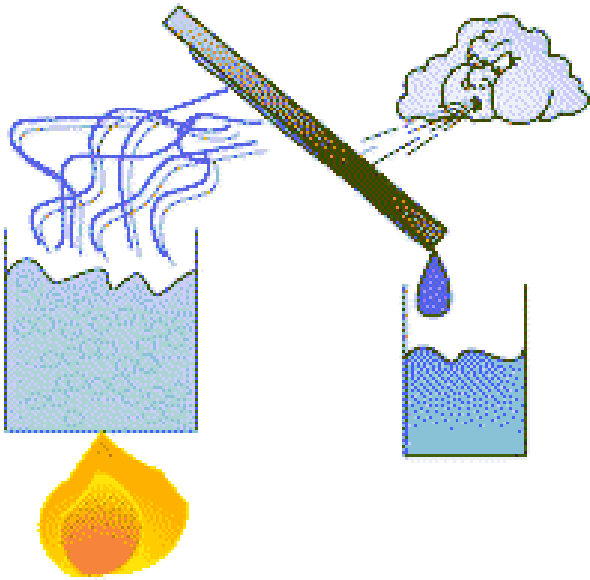
- Cálculo del flash
- Sistema de control del flash

4. Condiciones de Burbuja y Rocío

- Cálculo presión punto de burbuja
- Cálculo temperatura punto de burbuja
- Cálculo temperatura punto de rocío
- Cálculo presión punto de rocío

Destilación: Introducción

Una operación UNITARIA en la que una corriente Líquida o Vapor mezcla de dos o más componentes se separan en dos corrientes con una pureza especificada mediante el aporte y la eliminación de calor



- La destilación se basa en el hecho de que un vapor procedente de un líquido en ebullición estará más concentrado en el componente de menor punto de ebullición (más ligero).
- Cuando este vapor se enfría y el líquido condensado contendrá más componentes volátiles que el líquido de partida .
- Las columnas de destilación se diseñan para conseguir una separación especificada.

- La destilación es la tecnología de separación más frecuente en la Industria Química de Proceso
- Consumen enormes cantidades de energía de calentamiento y enfriamiento
- Contribuye con un 50 % al coste total de operación

Destilación: Introducción

La mejor forma de reducir los costes de operación en las unidades en operación, es mediante la optimización y control del proceso. Para lograr el objetivo es imprescindible entender los principios de la DESTILACION y las bases del diseño de esta importante operación de separación.

Por Tipo de Operación:

- Por Carga “Batch”
- Continua

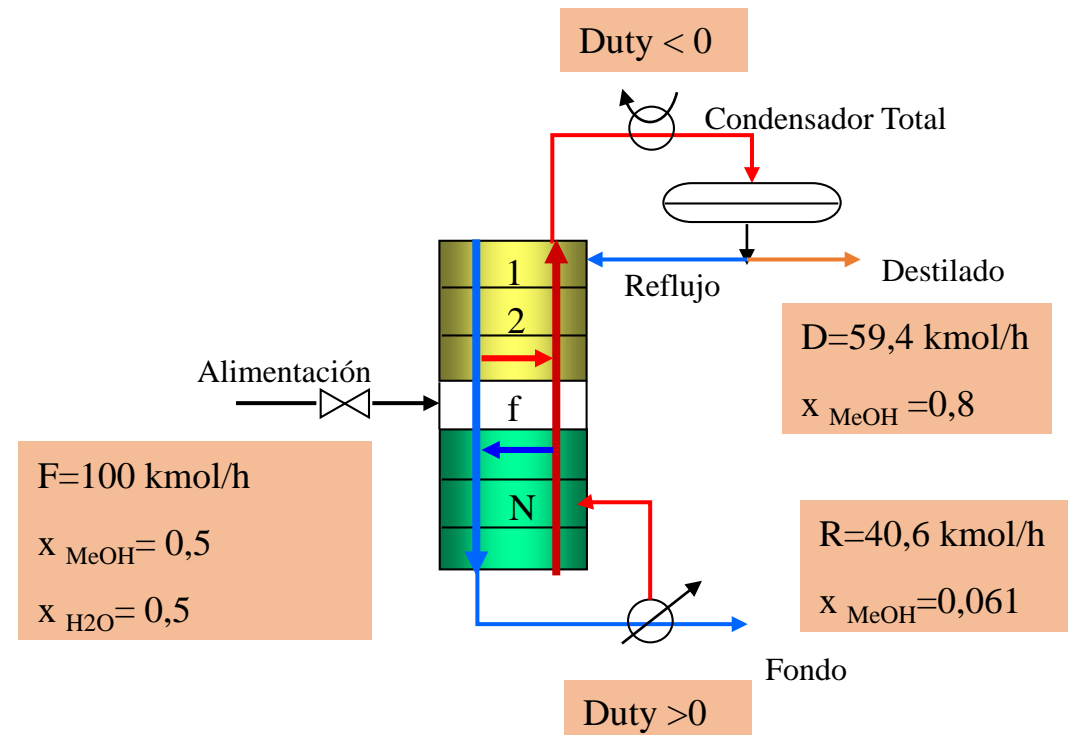
Con Alimentaciones Adicionales:

- Extractiva
- Azeotrópica

Por Tipo de Internos:

- De Etapas o Platos
- De Relleno

Destilación Continua de Platos

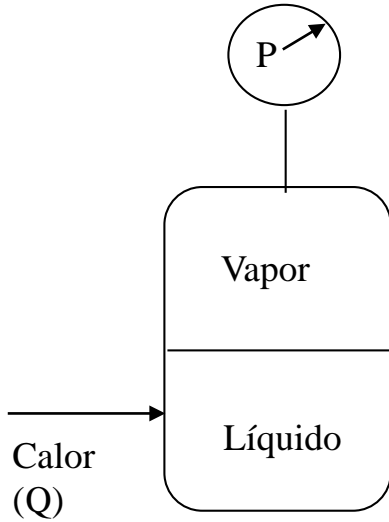


Destilación: Índice

1. Introducción
2. **Equilibrio Líquido-Vapor**
 - **Componente puro**
 - Mezclas binarias
 - Mezclas ideales. Modelos termodinámicos
 - Mezclas reales. Modelos de coeficientes de actividad
3. Flash Isotermo
 - Cálculo del flash
 - Sistema de control del flash
4. Condiciones de Burbuja y Rocío
 - Cálculo presión punto de burbuja
 - Cálculo temperatura punto de burbuja
 - Cálculo temperatura punto de rocío
 - Cálculo presión punto de rocío

Termodinámica: Líquido/Vapor Componente Puro

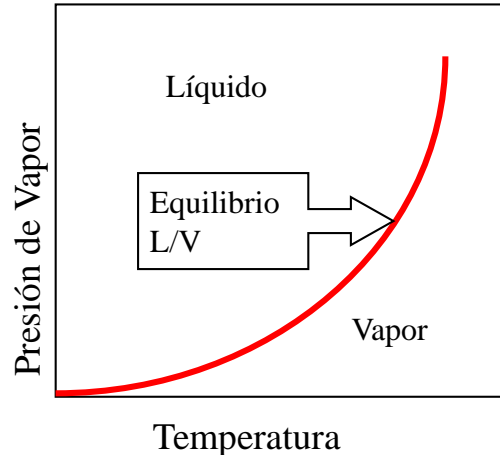
$$P = P^o_i = f(\text{temperatura})$$



Cuando un líquido (fase líquida) está retenido en un recipiente cerrado, las moléculas del líquido se evaporan en el espacio disponible (fase vapor), este vapor presurizará el recipiente como si fuera un gas, a esta presión se denomina presión de vapor del líquido

La presión de vapor es independiente de la cantidad de líquido presente en el recipiente, siempre que el líquido este presente en el recipiente

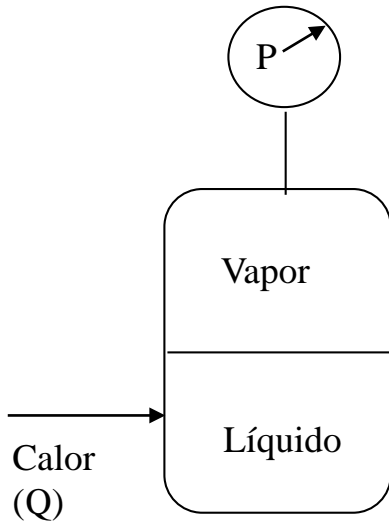
La presión de vapor de los líquidos aumenta considerablemente con la temperatura: la presión de vapor del Agua @ 50°C es 12.333 kPa (92,51 mm Hg) ; @ 100 °C es 101.325 kPa (760 mm Hg)



El punto de ebullición de un líquido (boiling point) se define como la temperatura a la que la presión de vapor de un líquido es igual a la presión total del sistema. Si la presión total del sistema es 760 mm Hg el punto de ebullición del agua es 100 °C

Termodinámica Líquido / Vapor Componente Puro

$$P = P^{\circ}_i = f(\text{temperatura})$$



Fracción Molar en el líquido $x_i = 1$

Fracción Molar en el vapor $y_i = 1$

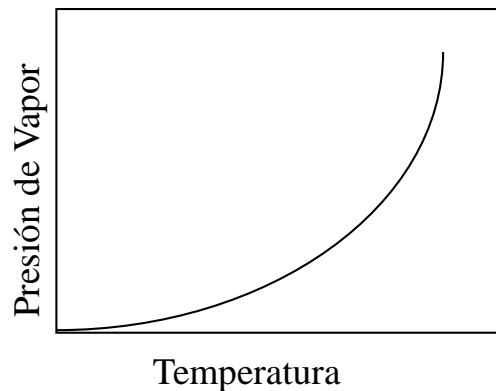
Presión Total del sistema = P

Presión de vapor = $P^{\circ}_i = f(\text{temperatura}) = P$

$$\ln P^{\circ}_i = A - \frac{B}{T + C}$$

Correlación de Antoine

P°_i (mm Hg), T (K)



La Temperatura de Ebullición

Cuando la presión de vapor del líquido es igual a la presión exterior se alcanza la ebullición.

Termodinámica Líquido / Vapor Componente Puro

$$\ln P_i^o = A - \frac{B}{T + C}$$

Correlación de Antoine

P_i^o (mm Hg), T (K)

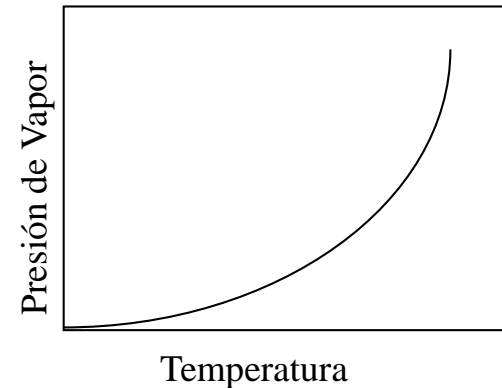
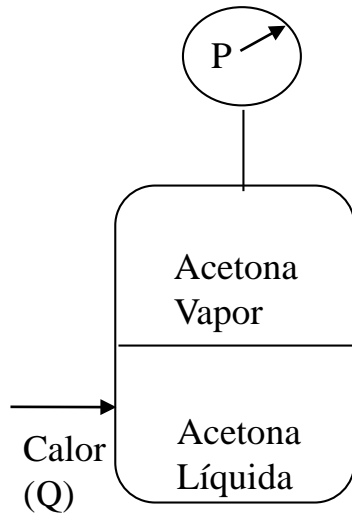
Nombre	Fórmula	Ant A	Ant B	Ant C
Metano	CH4	15,2243	597,84	-7,16
Acetona	C3H6O	16,6513	2940,46	-35,93
Etano	C2H6	15,6637	1511,42	-17,16
Etileno	C2H4	15,5368	1347,01	-18,15
Propano	C3H8	15,726	1872,46	-25,16
Propileno	C3H6	15,7027	1807,53	-26,15
Butano	C4H10	15,6782	2154,9	-34,42
1-Buteno	C4H8	15,7564	2132,42	-33,15
i-Butano	C4H10	15,5381	2032,73	-33,15
1-Penteno	C5H10	15,7646	2405,96	-39,63
n-Pentano	C5H12	15,8333	2477,07	-39,94
Benceno	C6H6	15,9008	2788,51	-52,36
Ciclohexano	C6H12	15,7527	2766,63	-50,5
1-Hexeno	C6H12	15,8089	2654,81	-47,3
Hexano	C6H14	15,8366	2697,55	-48,78
Tolueno	C7H8	16,0137	3096,52	-53,67
1-Hepteno	C7H14	15,8894	2895,51	-53,97
Heptano	C7H16	15,8737	2911,32	-56,51
Estireno	C8H8	16,0193	3328,57	-63,72
Octano	C8H18	15,9426	3120,29	-63,63
Metanol	CH4O	18,5875	3626,55	-34,29
1-2Dicloro Etano	C2H4CL2	16,1764	2927,17	-50,22

Problema Termodinámica Líquido / Vapor Componente Puro

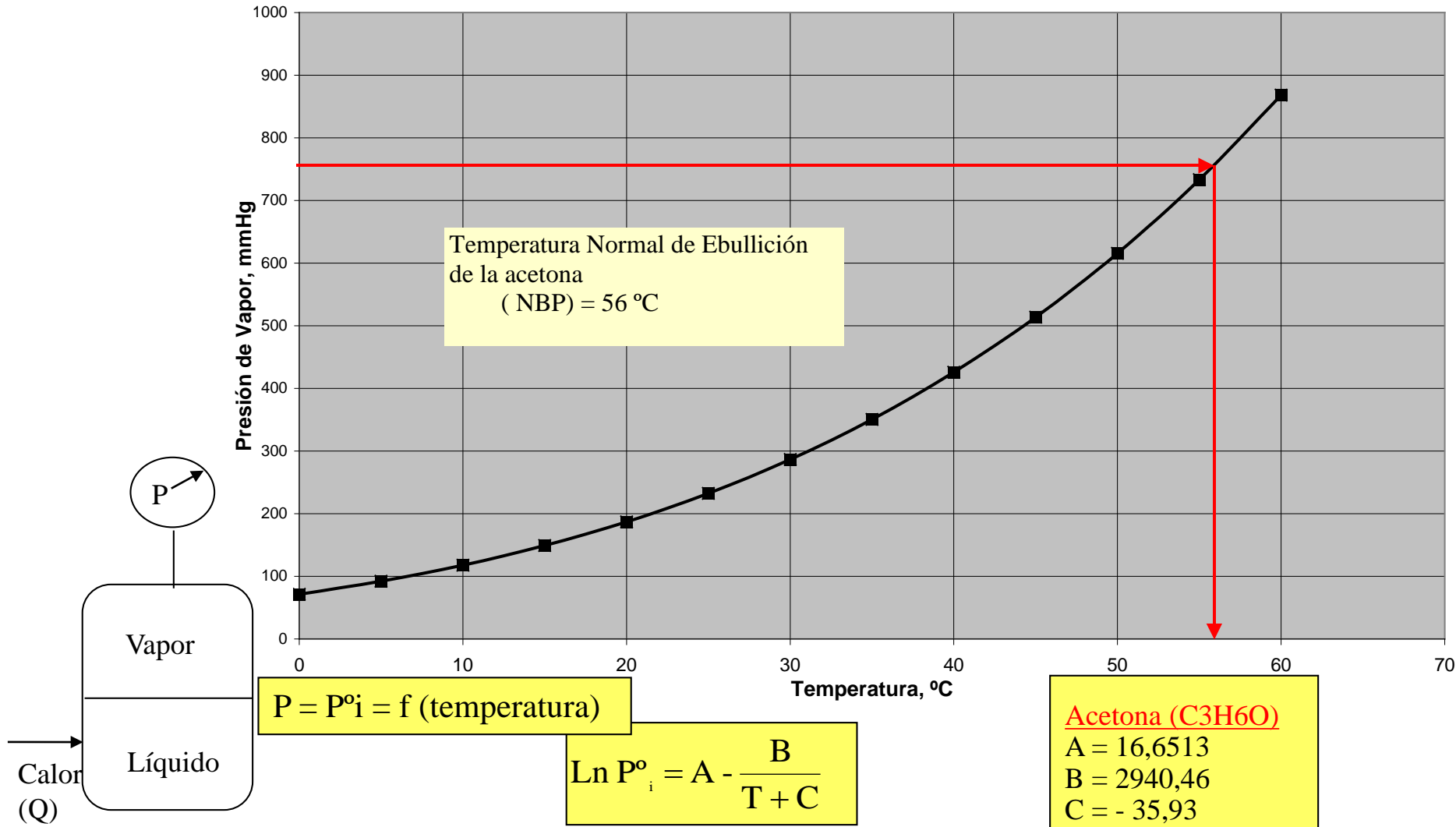
Determinar la presión de un recipiente cerrado que contiene acetona líquida pura, cuando se calienta desde 0 a 60 °C.

$$P = P^{\circ}_i = f(\text{temperatura})$$

$$\ln P^{\circ}_i = A - \frac{B}{T + C}$$



Problema Termodinámica Líquido / Vapor Componente Puro



°C	0	5	10	15	20	25	30	35	40	45	50	55	60
K	273,4	278,4	283,4	288,4	293,4	298,4	303,4	308,4	313,4	318,4	323,4	328,4	333,4
Ln P ^o _i	4,3	4,5	4,8	5,0	5,2	5,4	5,7	5,9	6,1	6,2	6,4	6,6	6,8
P ^o _i (mmHg)	71,4	92,2	117,8	149,1	186,9	232,4	286,5	350,5	425,8	513,6	615,6	733,2	868,2

Destilación: Índice

1. Introducción

2. Equilibrio Líquido-Vapor

- Componente puro

- **Mezclas binarias**

 - Mezclas ideales. Modelos termodinámicos

 - Mezclas reales. Modelos de coeficientes de actividad

3. Flash Isoterma

- Cálculo del flash

- Sistema de control del flash

4. Condiciones de Burbuja y Rocío

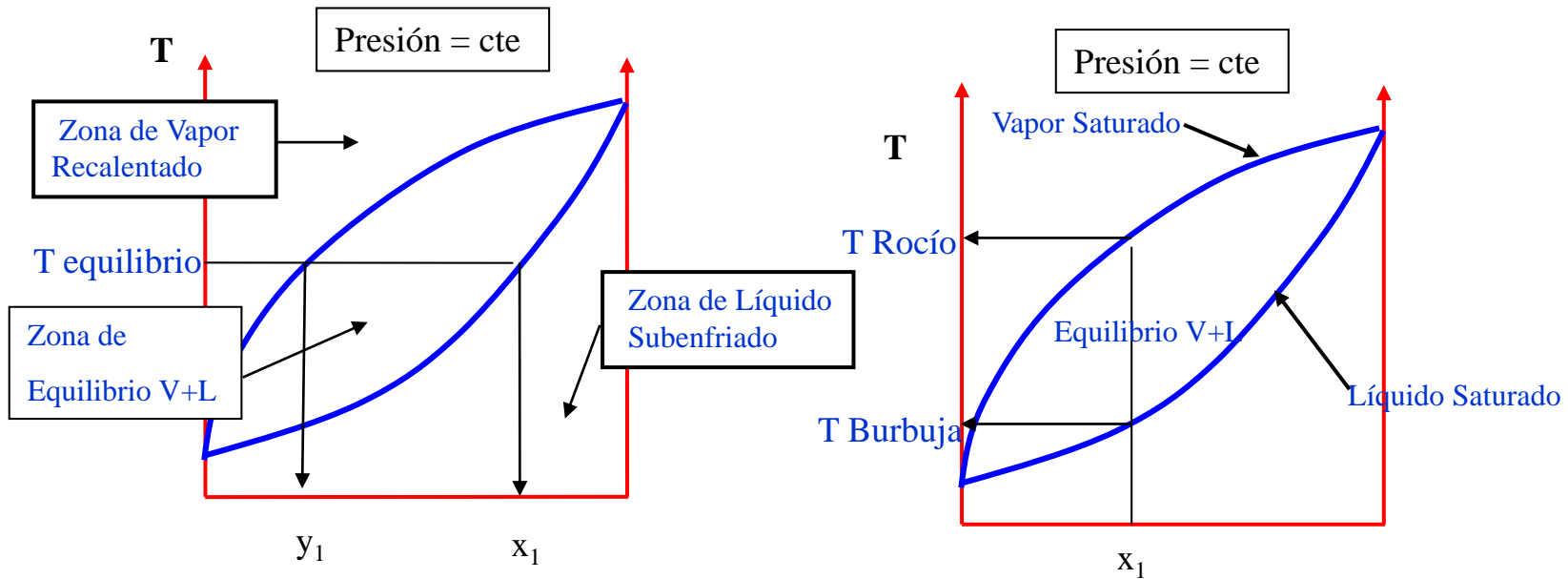
- Cálculo presión punto de burbuja

- Cálculo temperatura punto de burbuja

- Cálculo temperatura punto de rocío

- Cálculo presión punto de rocío

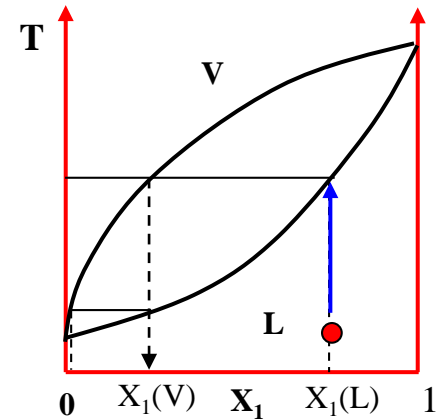
Equilibrio Líquido-Vapor Mezcla Binaria. Diagrama T-x-y



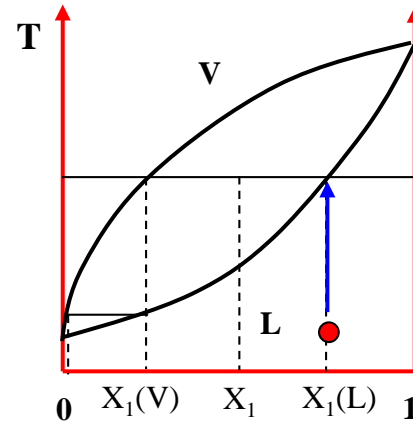
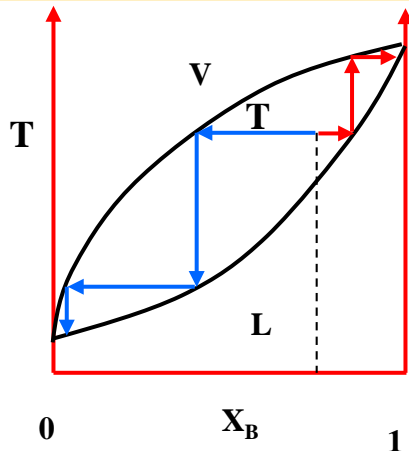
- Los diagrama de equilibrio de fases para los sistemas binarios (1,2) tienen frecuentemente la forma del diagrama superior (T-x-y) . Reproducen las composiciones del líquido y del vapor en equilibrio a una determinada temperatura y presión. Las diferencias entre estas composiciones ocasionan la **FUERZA IMPULSORA** de los métodos de separación Líquido-Vapor
- Las zonas de VAPOR , VAPO+LIQUIDO y LIQUIDO están delimitadas por las curvas de **ROCIO y de BURBUJA**.
- Para que exista **EQUILIBRIO LIQUIDO-VAPOR** , la temperatura del sistema debe estar comprendida entre la de Roció y de Burbuja

Equilibrio Líquido-Vapor Mezcla Binaria

➤ Si comenzamos con un líquido de composición $x_1(L)$ y calentamos hasta el punto de burbuja comenzaremos a formar un vapor de composición $x_1(V)$, que está más concentrado en el componente más volátil(2) . Este vapor puede ser separado, enfriado y condensado dando lugar a un líquido más concentrado que el de partida en componentes más volátiles (*más ligeros*)



➤ Si comenzamos con el mismo líquido , pero calentamos hasta alcanzar una temperatura entre las temperaturas de burbuja y de rocío (T_b , T_d) se puede conseguir una separación pero los productos son menos puros.....



Regla de la palanca:

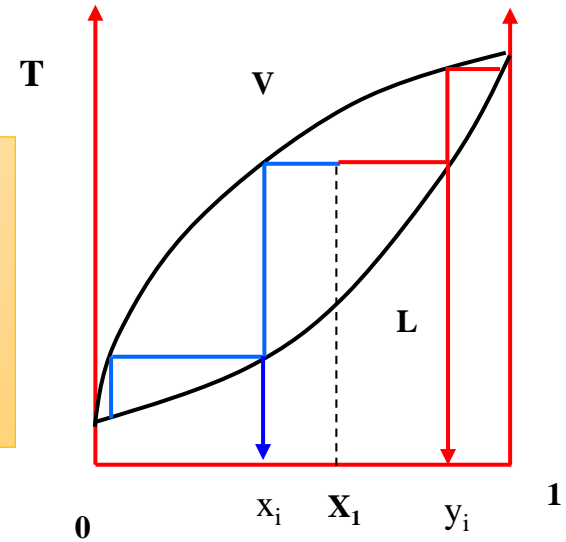
$$\text{fracción}_L = \frac{X_1 - X_1^V}{X_1^L - X_1^V}$$

$$\text{fracción}_V = \frac{X_1^L - X_1}{X_1^L - X_1^V}$$

El líquido separado puede ser calentado hasta el punto de rocío para formar un líquido más concentrado en especies menos volátiles (*más pesadas*)

Relación de Equilibrio K_i

- La separación es posible porque existe una relación de equilibrio K_i **DIFERENTE DE LA UNIDAD**
- La relación de equilibrio K_i es la relación de concentración del componente i en ambas fases .

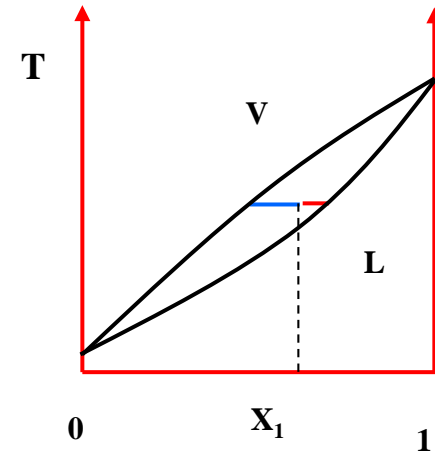


Para el equilibrio Líquido-Vapor la relación de equilibrio se expresa :

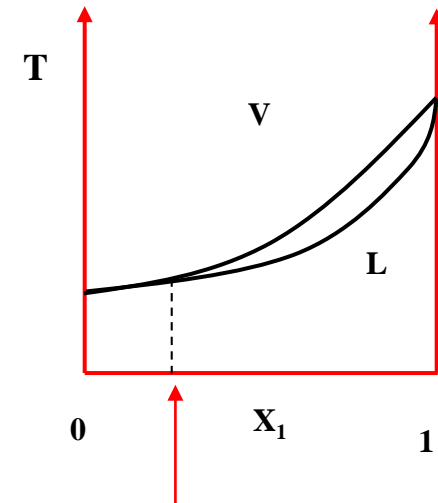
$$K_i = \frac{y_i}{X_i}$$

Casos de Difícil Separación

En este caso el diagrama de equilibrio T-x-y indica que la separación será difícil debido a la pequeña diferencia entre las concentraciones de equilibrio del componente 1 en ambas fases

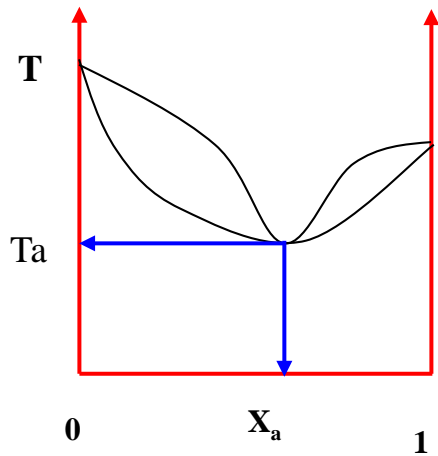


El **AZEOTROPO** representado en este diagrama T-x-y dificultará la separación porque la composición del vapor y del líquido son iguales.

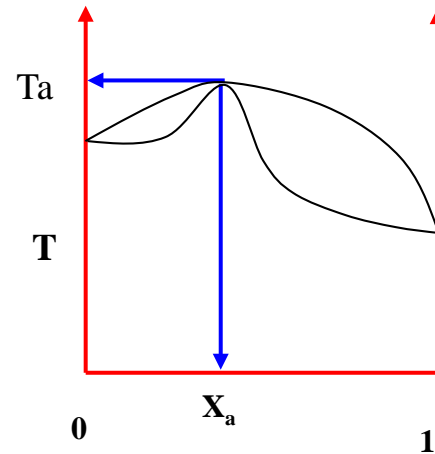


Composición del azeótropo

Casos de Difícil Separación



El sistema EtOH-Agua presenta un azeótropo de **mínimo punto de ebullición**

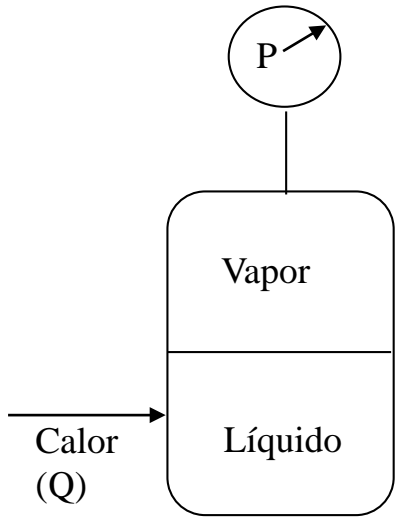


El sistema Cloroformo-Acetona presenta un azeótropo de **máximo punto de ebullición**

Destilación: Índice

1. Introducción
2. Equilibrio Líquido-Vapor
 - Componente puro
 - **Mezclas binarias**
 - **Mezclas ideales. Modelos termodinámicos**
 - Mezclas reales. Modelos de coeficientes de actividad
3. Flash Isotermo
 - Cálculo del flash
 - Sistema de control del flash
4. Condiciones de Burbuja y Rocío
 - Cálculo presión punto de burbuja
 - Cálculo temperatura punto de burbuja
 - Cálculo temperatura punto de rocío
 - Cálculo presión punto de rocío

Termodinámica Líquido-Vapor Mezcla Binaria



Fracción Molar en el líquido x_i , $i=1,2$
 Fracción Molar en el vapor y_i , $i=1,2$
 Presión Total del sistema = P
 Presión de vapor = P°_i , $i=1,2$
 Presión Parcial = P_i , $i=1,2$
 Relación de equilibrio K_i , $i=1,2$
 Volatilidad Relativa = α_{12}

$$P = P_1 + P_2 = f(\text{temperatura})$$

$$P_1 = P y_1 ; P_2 = P y_2 \quad \text{Ley de Dalton}$$

$$P_1 = P^{\circ}_1 x_1 ; P_2 = P^{\circ}_2 x_2 \quad \text{Ley de Raoult}$$

$$P = P^{\circ}_1 x_1 + (1-x_1) P^{\circ}_2$$

$$x_1 = (P - P^{\circ}_2) / (P^{\circ}_1 - P^{\circ}_2) ; y_1 = P_1 / P = P^{\circ}_1 x_1 / P$$

$$\alpha_{12} = K_1 / K_2 = (y_1/x_1) / (y_2/x_2) = (y_1/x_1) / \{(1-y_1)/(1-x_1)\}$$

$$y_1 = (\alpha_{12} x_1) / \{1 + x_1(\alpha_{12} - 1)\}$$

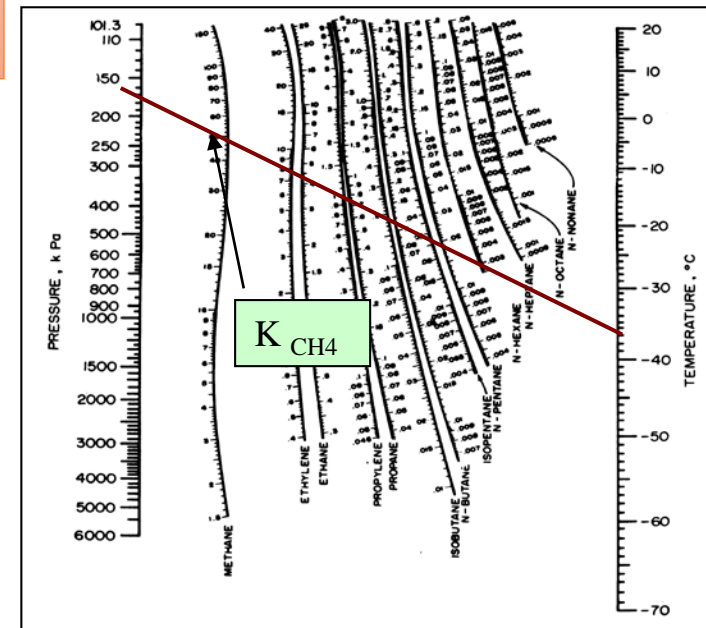
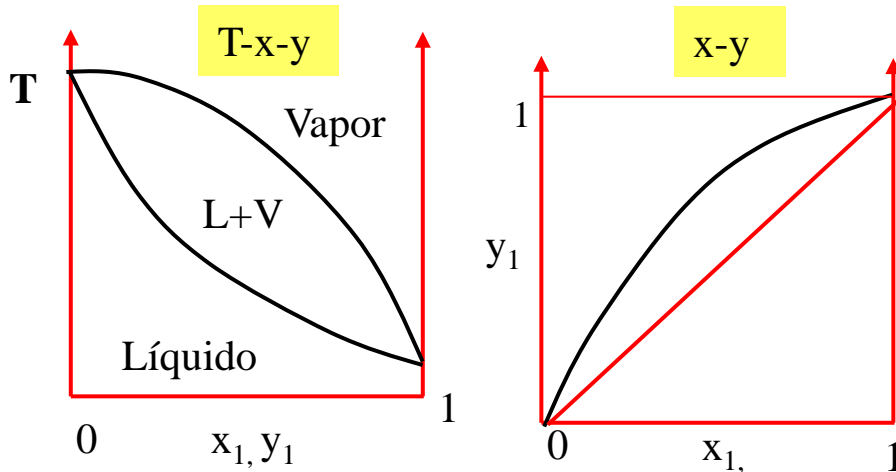
$$K_1 = y_1/x_1 = P^{\circ}_1/P = f(T, P)$$

$$K_2 = y_2/x_2 = P^{\circ}_2/P = f(T, P)$$

$$\alpha_{12} = K_1/K_2 = P^{\circ}_1/P^{\circ}_2 = f(T)$$

Ecuación de Antoine

$$\ln P^{\circ}_2 = A_2 - \frac{B_2}{T + C_2} \quad \ln P^{\circ}_1 = A_1 + \frac{B_1}{T - C_1}$$

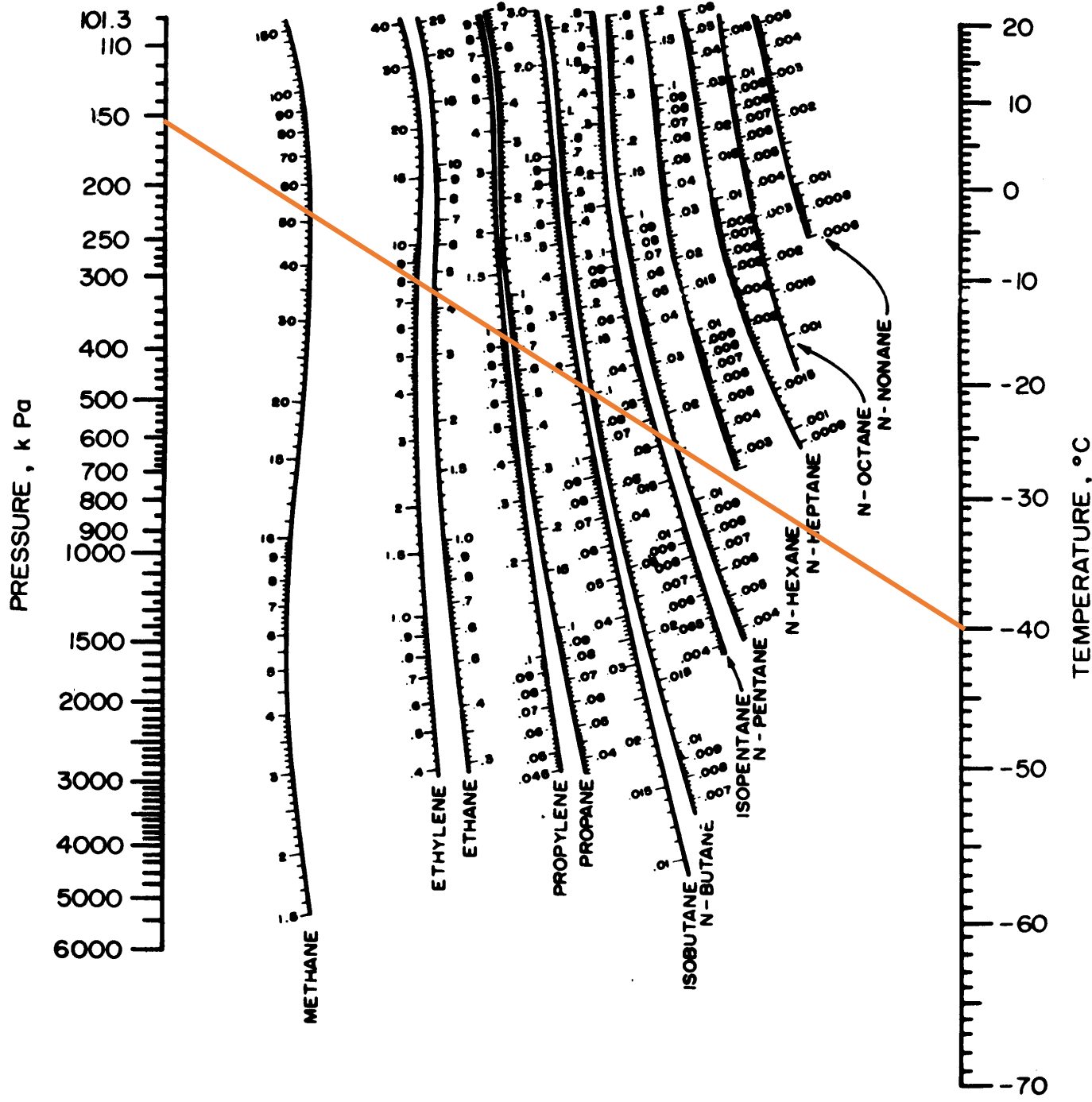


Constantes de la Ecuación de Antoine

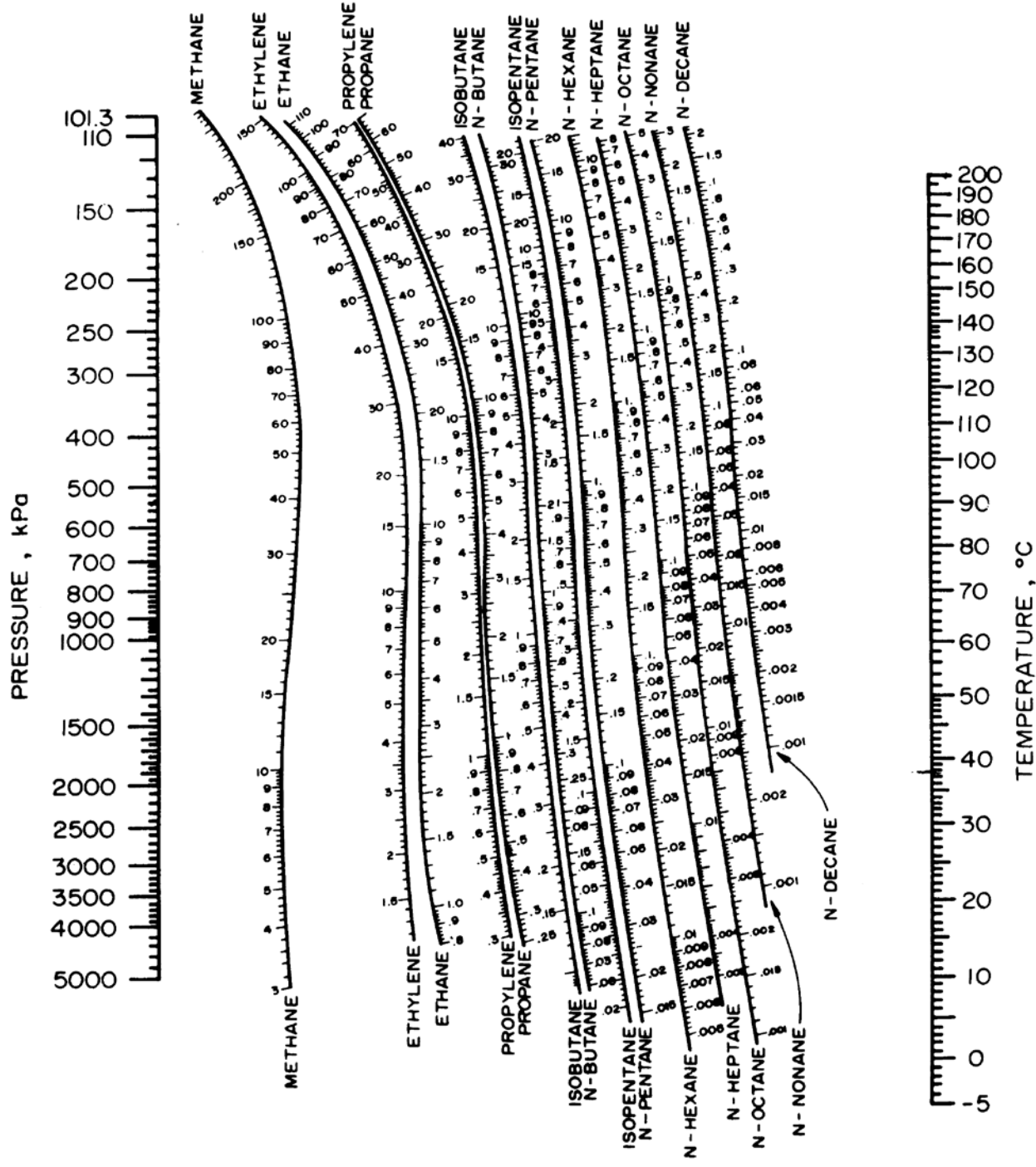
$$\ln P^{\circ} = A - \frac{B}{T + C}$$

Nombre	Fórmula	Ant A	Ant B	Ant C
Metano	CH ₄	15,2243	597,84	-7,16
Acetona	C ₃ H ₆ O	16,6513	2940,46	-35,93
Etano	C ₂ H ₆	15,6637	1511,42	-17,16
Etileno	C ₂ H ₄	15,5368	1347,01	-18,15
Propano	C ₃ H ₈	15,726	1872,46	-25,16
Propileno	C ₃ H ₆	15,7027	1807,53	-26,15
Butano	C ₄ H ₁₀	15,6782	2154,9	-34,42
1-Buteno	C ₄ H ₈	15,7564	2132,42	-33,15
i-Butano	C ₄ H ₁₀	15,5381	2032,73	-33,15
1-Penteno	C ₅ H ₁₀	15,7646	2405,96	-39,63
n-Pentano	C ₅ H ₁₂	15,8333	2477,07	-39,94
Benceno	C ₆ H ₆	15,9008	2788,51	-52,36
Ciclohexano	C ₆ H ₁₂	15,7527	2766,63	-50,5
1-Hexeno	C ₆ H ₁₂	15,8089	2654,81	-47,3
Hexano	C ₆ H ₁₄	15,8366	2697,55	-48,78
Tolueno	C ₇ H ₈	16,0137	3096,52	-53,67
1-Hepteno	C ₇ H ₁₄	15,8894	2895,51	-53,97
Heptano	C ₇ H ₁₆	15,8737	2911,32	-56,51
Estireno	C ₈ H ₈	16,0193	3328,57	-63,72
Octano	C ₈ H ₁₈	15,9426	3120,29	-63,63
Metanol	CH ₄ O	18,5875	3626,55	-34,29
1-2Dicloro Etano	C ₂ H ₄ CL ₂	16,1764	2927,17	-50,22

DePriester : Baja Temperatura

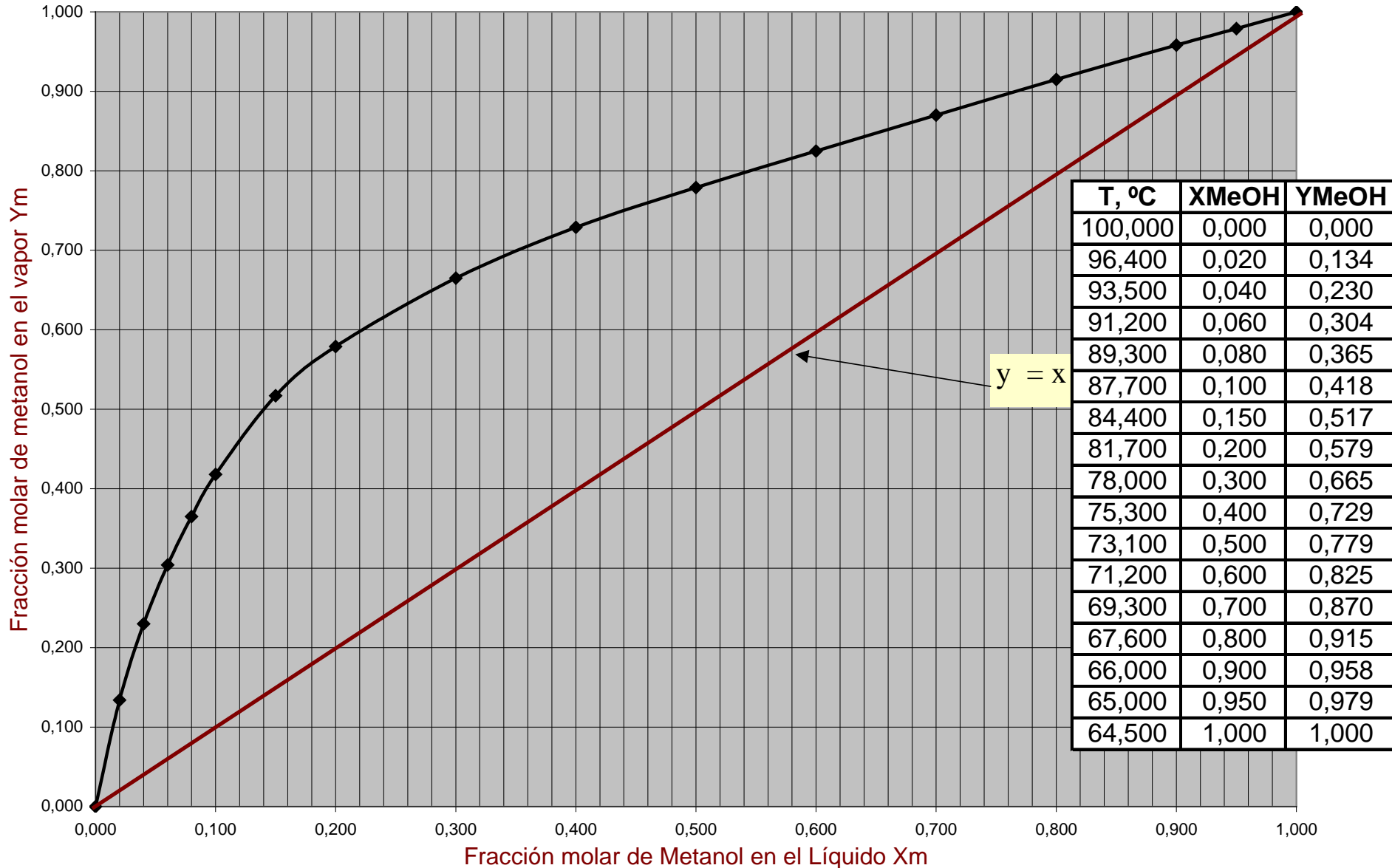


DePriester : Alta Temperatura

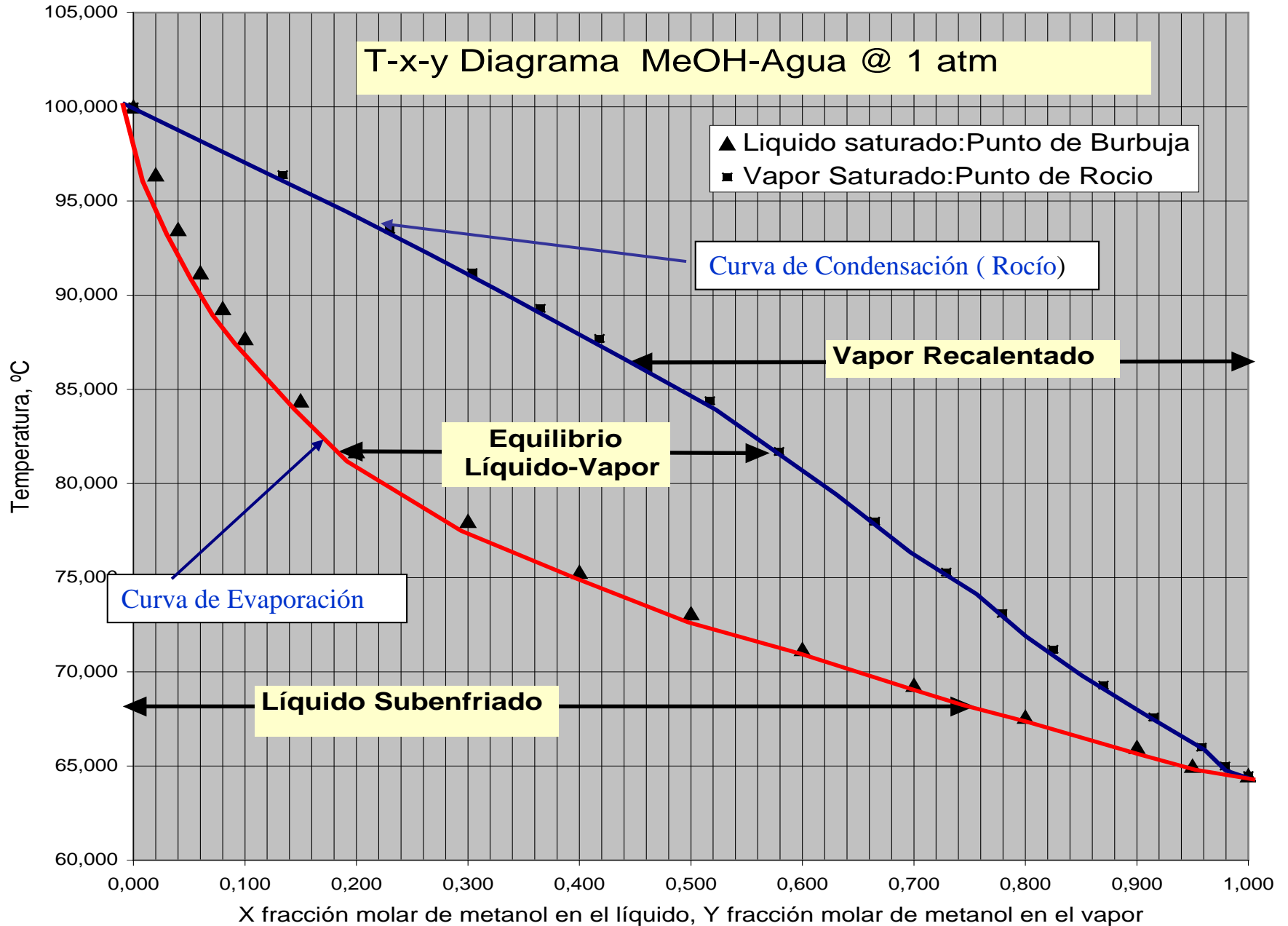


Equilibrio Líquido-Vapor MeOH-Agua @ 1 atm

Diagrama x-y MeOH-Agua @ 1 atm



Equilibrio Líquido-Vapor MeOH-Agua @ 1 atm



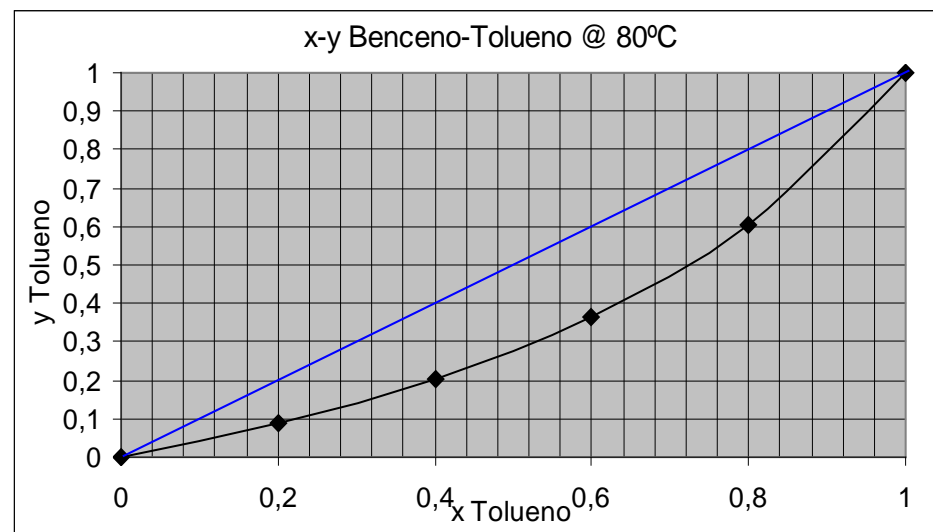
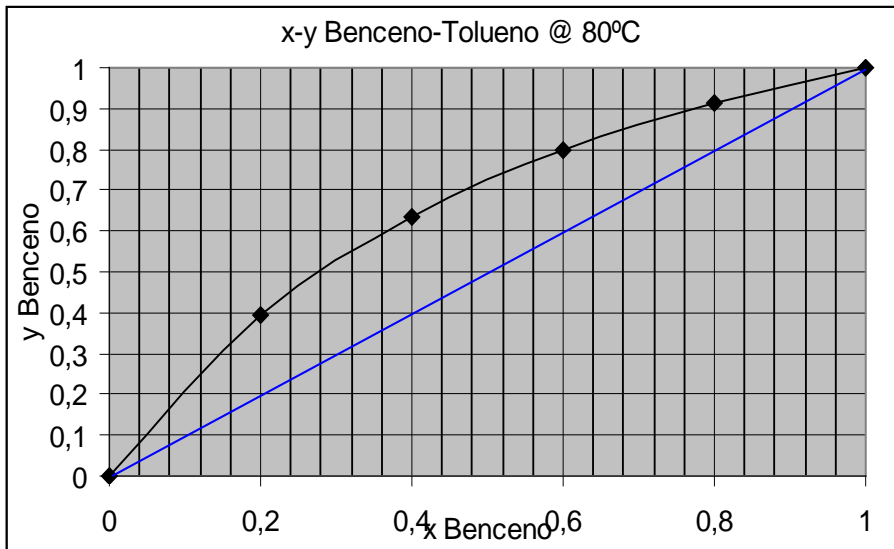
Problema : Equilibrio Líquido-Vapor Mezcla Binaria

Las presiones de vapor del Benceno (B) y del Tolueno (T) a 80°C son 757,7 y 291,2 mmHg respectivamente. a) Estimar α_{BT} a 80°C ; b) y_B para $x_B = 0; 0,2; 0,4; 0,6; 0,8$ y 1

a) Considerando comportamiento ideal para el vapor y el líquido: $\alpha_{BT} = P_B^o / P_T^o = 757,7 / 291,2 = 2,6$

b) $y_1 = (\alpha_{BT} x_B) / \{1 + x_B (\alpha_{BT} - 1)\} = (2,6 x_B) / (1 + x_B (1,6))$

x_B	0	0,2	0,4	0,6	0,8	1,0
y_B	0	0,39	0,634	0,796	0,912	1,0



Problema : Equilibrio Líquido-Vapor Mezcla Binaria

Considerando comportamiento ideal en las fases vapor y líquida, calcular el diagrama de equilibrio Líquido-Vapor de la mezcla Tolueno Benceno a 1, 1.5 y 2 atm

Las constantes de la ecuación an Antoine para estos dos compuestos son:

	Benceno	Tolueno
A	15,9	16,014
B	2788,5	3096,520
C	-52,4	-53,670

$$P = P_1 + P_2 = f(\text{temperatura})$$

$$P_1 = P y_1 ; P_2 = P y_2 \quad \text{Ley de Dalton}$$

$$P_1 = P^{\circ}_1 x_1 ; P_2 = P^{\circ}_2 x_2 \quad \text{Ley de Raoult}$$

$$K_1 = y_1/x_1 ; K_2 = y_2/x_2 = f(T, P)$$

$$\alpha_{12} = K_1/K_2 = P^{\circ}_1/P^{\circ}_2$$

$$P = P^{\circ}_1 x_1 + (1-x_1) P^{\circ}_2$$

$$x_1 = (P - P^{\circ}_2)/(P^{\circ}_1 - P^{\circ}_2)$$

$$y_1 = P_1/P = P^{\circ}_1 x_1 / P$$

$$\ln P^{\circ}_1 = A_1 - \frac{B_1}{T + C_1} \quad \ln P^{\circ}_2 = A_2 - \frac{B_2}{T + C_2}$$

Problema Líquido-Vapor Mezcla Benceno-Tolueno

$$K_1 = y_1/x_1 ; K_2 = y_2/x_2 = f(T, P)$$

$$\alpha_{12} = K_1/K_2 = P_1^o/P_2^o$$

$$P = P_1^o x_1 + (1-x_1) P_2^o$$

$$x_1 = (P - P_2^o)/(P_1^o - P_2^o)$$

$$y_1 = P_1/P = P_1^o x_1 / P$$

$$\ln P_1^o = A_1 - \frac{B_1}{T + C_1} \quad \ln P_2^o = A_2 - \frac{B_2}{T + C_2}$$

760 P(mm Hg)

T	T	Ln P ^o	Ln P ^o	P ^o Bz	P ^o To	X	Y	X	Y	K	K	α ₁₂
°C	K	Benceno	Tolueno	mm Hg	mm Hg	Benceno	Benceno	Tolueno	Tolueno	Benceno	Tolueno	
79,85	353,3	6,633	5,677	759,956	292,217	1,00	1,00	0,00	0,00	1,000	0,384	2,601
82	355,4	6,699	5,751	811,603	314,551	0,90	0,96	0,10	0,04	1,068	0,414	2,580
84	357,4	6,759	5,819	862,076	336,542	0,81	0,91	0,19	0,09	1,134	0,443	2,562
86	359,4	6,819	5,885	914,968	359,753	0,72	0,87	0,28	0,13	1,204	0,473	2,543
88	361,4	6,878	5,951	970,357	384,231	0,64	0,82	0,36	0,18	1,277	0,506	2,525
90	363,4	6,936	6,016	1028,321	410,025	0,57	0,77	0,43	0,23	1,353	0,540	2,508
92	365,4	6,993	6,080	1088,941	437,187	0,50	0,71	0,50	0,29	1,433	0,575	2,491
94	367,4	7,050	6,144	1152,295	465,766	0,43	0,65	0,57	0,35	1,516	0,613	2,474
96	369,4	7,105	6,206	1218,466	495,817	0,37	0,59	0,63	0,41	1,603	0,652	2,457
98	371,4	7,160	6,268	1287,536	527,390	0,31	0,52	0,69	0,48	1,694	0,694	2,441
100	373,4	7,215	6,329	1359,586	560,542	0,25	0,45	0,75	0,55	1,789	0,738	2,425
102	375,4	7,269	6,389	1434,700	595,325	0,20	0,37	0,80	0,63	1,888	0,783	2,410
104	377,4	7,322	6,449	1512,963	631,797	0,15	0,29	0,85	0,71	1,991	0,831	2,395
106	379,4	7,374	6,507	1594,459	670,014	0,10	0,20	0,90	0,80	2,098	0,882	2,380
108	381,4	7,426	6,565	1679,273	710,034	0,05	0,11	0,95	0,89	2,210	0,934	2,365
110	383,4	7,477	6,623	1767,491	751,914	0,01	0,02	0,99	0,98	2,326	0,989	2,351
110,4	383,8	7,487	6,634	1785,551	760,519	0,00	0,00	1,00	1,00	2,349	1,001	2,348

Problema Líquido-Vapor Mezcla Benceno-Tolueno

$$K_1 = y_1/x_1 ; K_2 = y_2/x_2 = f(T, P)$$

$$\alpha_{12} = K_1/K_2 = P_1^o/P_2^o$$

$$P = P_1^o x_1 + (1-x_1) P_2^o$$

$$x_1 = (P - P_2^o)/(P_1^o - P_2^o)$$

$$y_1 = P_1/P = P_1^o x_1 / P$$

$$\ln P_1^o = A_1 - \frac{B_1}{T + C_1} \quad \ln P_2^o = A_2 - \frac{B_2}{T + C_2}$$

1148 P(mm Hg)

T	T	Ln P ^o	Ln P ^o	P ^o Bz	P ^o To	X	Y	X	Y	K	K	α ₁₂
°C	K	Benceno	Tolueno	mm Hg	mm Hg	Benceno	Benceno	Tolueno	Tolueno	Benceno	Tolueno	
94	367,4	7,050	6,144	1152,295	465,766	0,99	1,00	0,01	0,00	1,004	0,406	2,474
96	369,4	7,105	6,206	1218,466	495,817	0,90	0,96	0,10	0,04	1,061	0,432	2,457
98	371,4	7,160	6,268	1287,536	527,390	0,82	0,92	0,18	0,08	1,122	0,459	2,441
100	373,4	7,215	6,329	1359,586	560,542	0,74	0,87	0,26	0,13	1,184	0,488	2,425
102	375,4	7,269	6,389	1434,700	595,325	0,66	0,82	0,34	0,18	1,250	0,519	2,410
104	377,4	7,322	6,449	1512,963	631,797	0,59	0,77	0,41	0,23	1,318	0,550	2,395
106	379,4	7,374	6,507	1594,459	670,014	0,52	0,72	0,48	0,28	1,389	0,584	2,380
108	381,4	7,426	6,565	1679,273	710,034	0,45	0,66	0,55	0,34	1,463	0,618	2,365
110	383,4	7,477	6,623	1767,491	751,914	0,39	0,60	0,61	0,40	1,540	0,655	2,351
112	385,4	7,528	6,679	1859,201	795,715	0,33	0,54	0,67	0,46	1,620	0,693	2,337
114	387,4	7,578	6,735	1954,488	841,496	0,28	0,47	0,72	0,53	1,703	0,733	2,323
116	389,4	7,627	6,790	2053,440	889,318	0,22	0,40	0,78	0,60	1,789	0,775	2,309
118	391,4	7,676	6,845	2156,145	939,243	0,17	0,32	0,83	0,68	1,878	0,818	2,296
120	393,4	7,724	6,899	2262,692	991,333	0,12	0,24	0,88	0,76	1,971	0,864	2,282
122	395,4	7,772	6,952	2373,168	1045,650	0,08	0,16	0,92	0,84	2,067	0,911	2,270
124	397,4	7,819	7,005	2487,664	1102,260	0,03	0,07	0,97	0,93	2,167	0,960	2,257
125,5	398,9	7,854	7,044	2576,226	1146,260	0,00	0,00	1,00	1,00	2,244	0,998	2,248

Problema Líquido-Vapor Mezcla Benceno-Tolueno

$$K_1 = y_1/x_2 ; K_2 = y_2/x_2 = f(T, P)$$

$$\alpha_{12} = K_1/K_2 = P^\circ_1/P^\circ_2$$

$$P = P^\circ_1 x_1 + (1-x_1) P^\circ_2$$

$$x_1 = (P - P^\circ_2)/(P^\circ_1 - P^\circ_2)$$

$$y_1 = P_1/P = P^\circ_1 x_1 / P$$

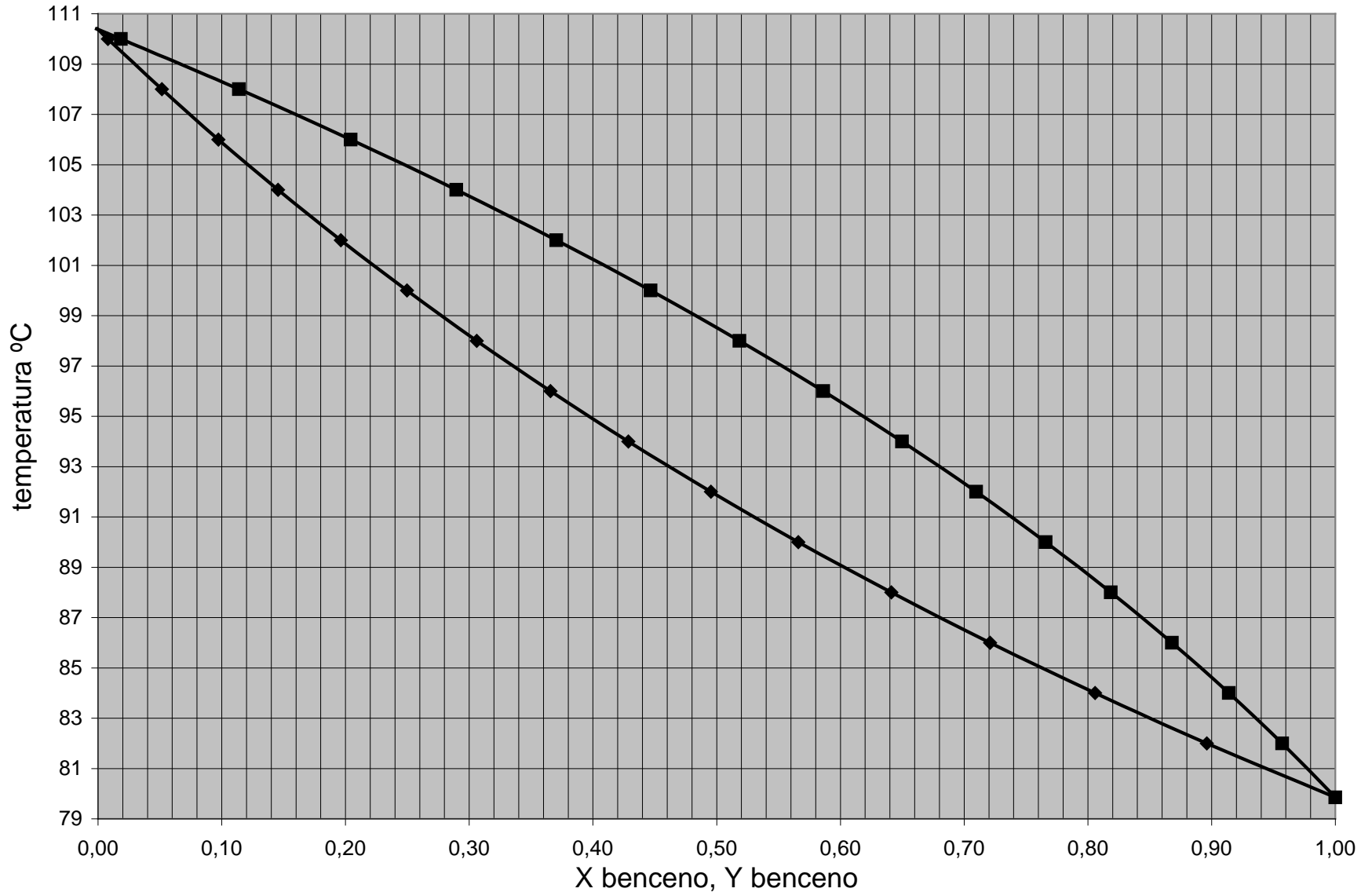
$$\ln P^\circ_1 = A_1 - \frac{B_1}{T + C_1} \quad \ln P^\circ_2 = A_2 - \frac{B_2}{T + C_2}$$

1520 P(mm Hg)

T	T	Ln P°	Ln P°	P° Bz	P° To	X	Y	X	Y	K	K	α12
°C	K	Benceno	Tolueno	mm Hg	mm Hg	Benceno	Benceno	Tolueno	Tolueno	Benceno	Tolueno	
104	377,4	7,322	6,449	1512,963	631,797	1,01	1,00	-0,01	0,00	0,995	0,416	2,395
106	379,4	7,374	6,507	1594,459	670,014	0,92	0,96	0,08	0,04	1,049	0,441	2,380
108	381,4	7,426	6,565	1679,273	710,034	0,84	0,92	0,16	0,08	1,105	0,467	2,365
110	383,4	7,477	6,623	1767,491	751,914	0,76	0,88	0,24	0,12	1,163	0,495	2,351
112	385,4	7,528	6,679	1859,201	795,715	0,68	0,83	0,32	0,17	1,223	0,523	2,337
114	387,4	7,578	6,735	1954,488	841,496	0,61	0,78	0,39	0,22	1,286	0,554	2,323
116	389,4	7,627	6,790	2053,440	889,318	0,54	0,73	0,46	0,27	1,351	0,585	2,309
118	391,4	7,676	6,845	2156,145	939,243	0,48	0,68	0,52	0,32	1,419	0,618	2,296
120	393,4	7,724	6,899	2262,692	991,333	0,42	0,62	0,58	0,38	1,489	0,652	2,282
122	395,4	7,772	6,952	2373,168	1045,650	0,36	0,56	0,64	0,44	1,561	0,688	2,270
124	397,4	7,819	7,005	2487,664	1102,260	0,30	0,49	0,70	0,51	1,637	0,725	2,257
126	399,4	7,866	7,057	2606,267	1161,225	0,25	0,43	0,75	0,57	1,715	0,764	2,244
128	401,4	7,912	7,109	2729,069	1222,612	0,20	0,35	0,80	0,65	1,795	0,804	2,232
130	403,4	7,957	7,160	2856,157	1286,486	0,15	0,28	0,85	0,72	1,879	0,846	2,220
132	405,4	8,002	7,210	2987,623	1352,913	0,10	0,20	0,90	0,80	1,966	0,890	2,208
134	407,4	8,047	7,260	3123,556	1421,960	0,06	0,12	0,94	0,88	2,055	0,936	2,197
136,5	409,9	8,102	7,321	3299,891	1512,057	0,00	0,01	1,00	0,99	2,171	0,995	2,182

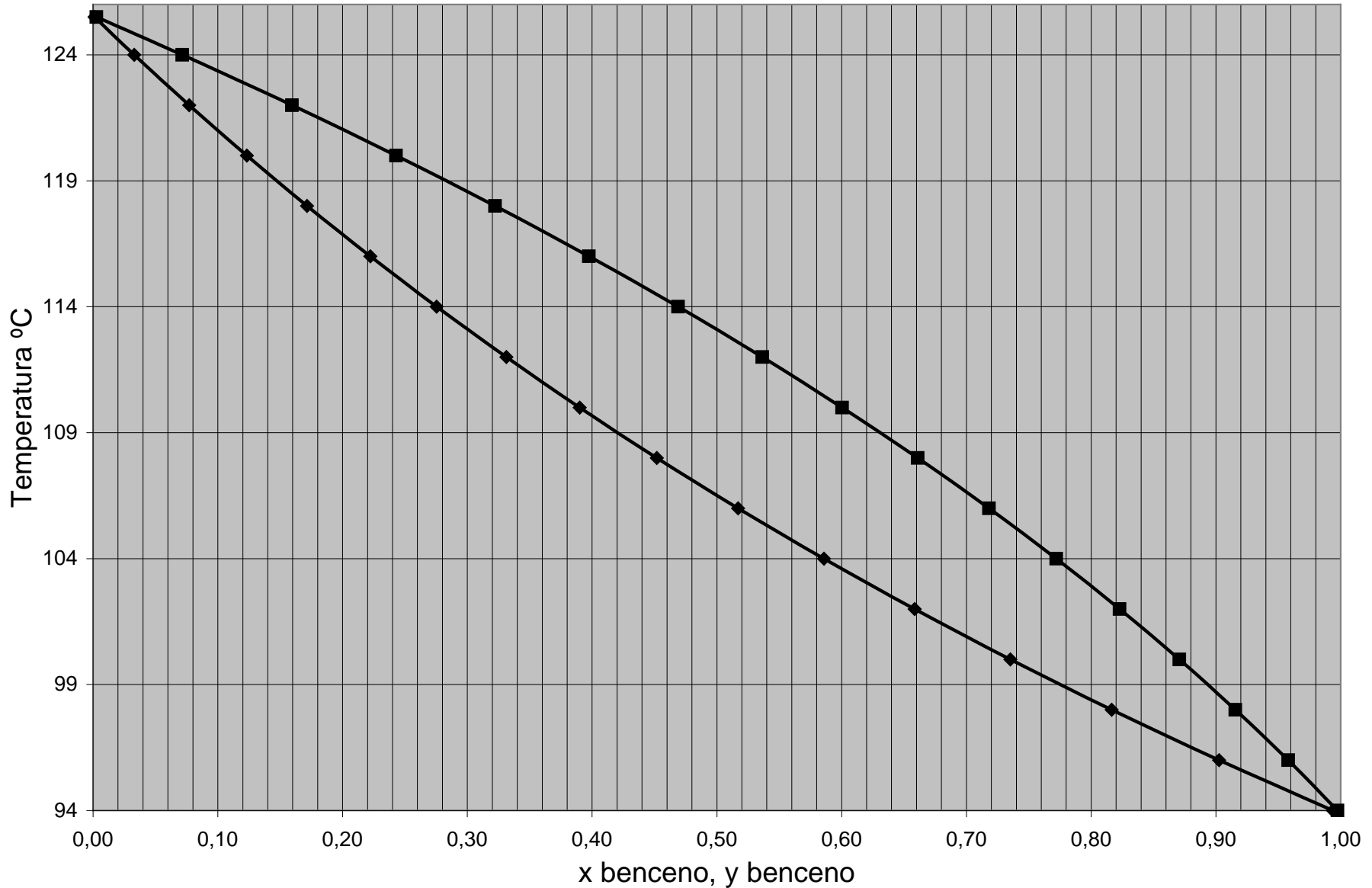
Problema Líquido-Vapor Mezcla Benceno-Tolueno

T-x-y benceno-Tolueno @ 760 mmHg



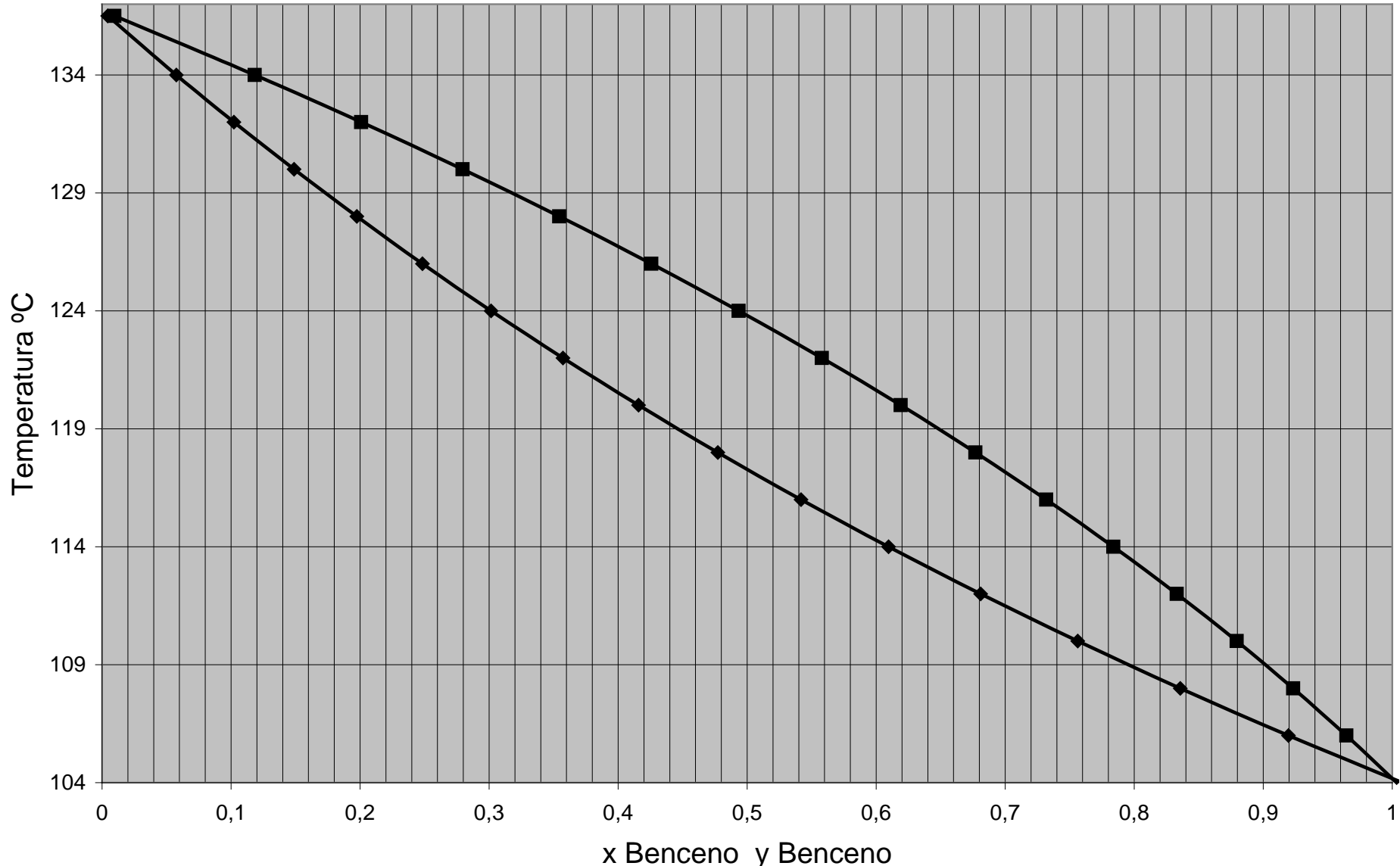
Problema Líquido-Vapor Mezcla Benceno-Tolueno

T-x-y Benceno-Tolueno @ 1140 mmHg



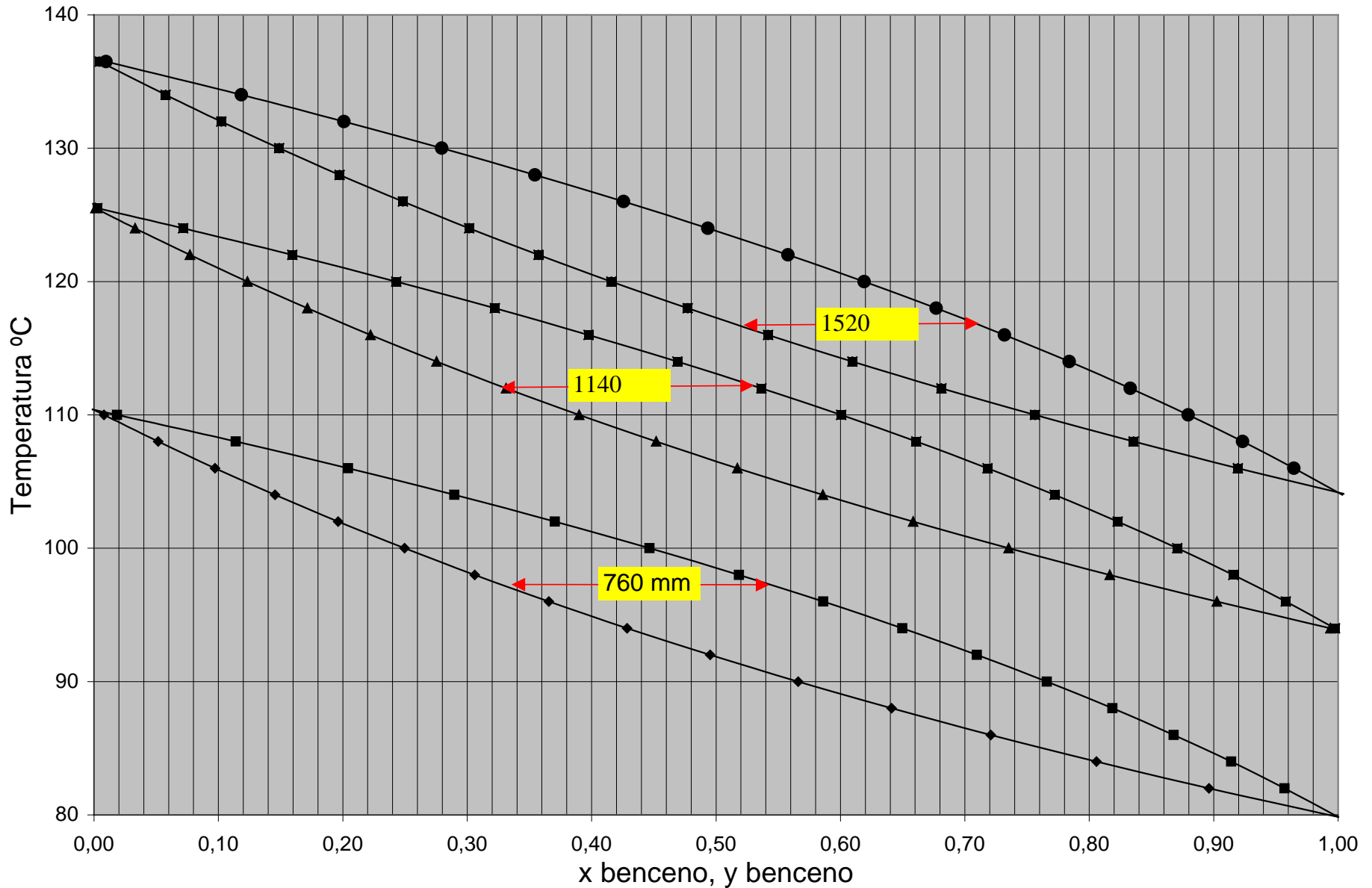
Problema Líquido-Vapor Mezcla Benceno-Tolueno

T-x-y Benceno-Tolueno @ 1520 mmHg



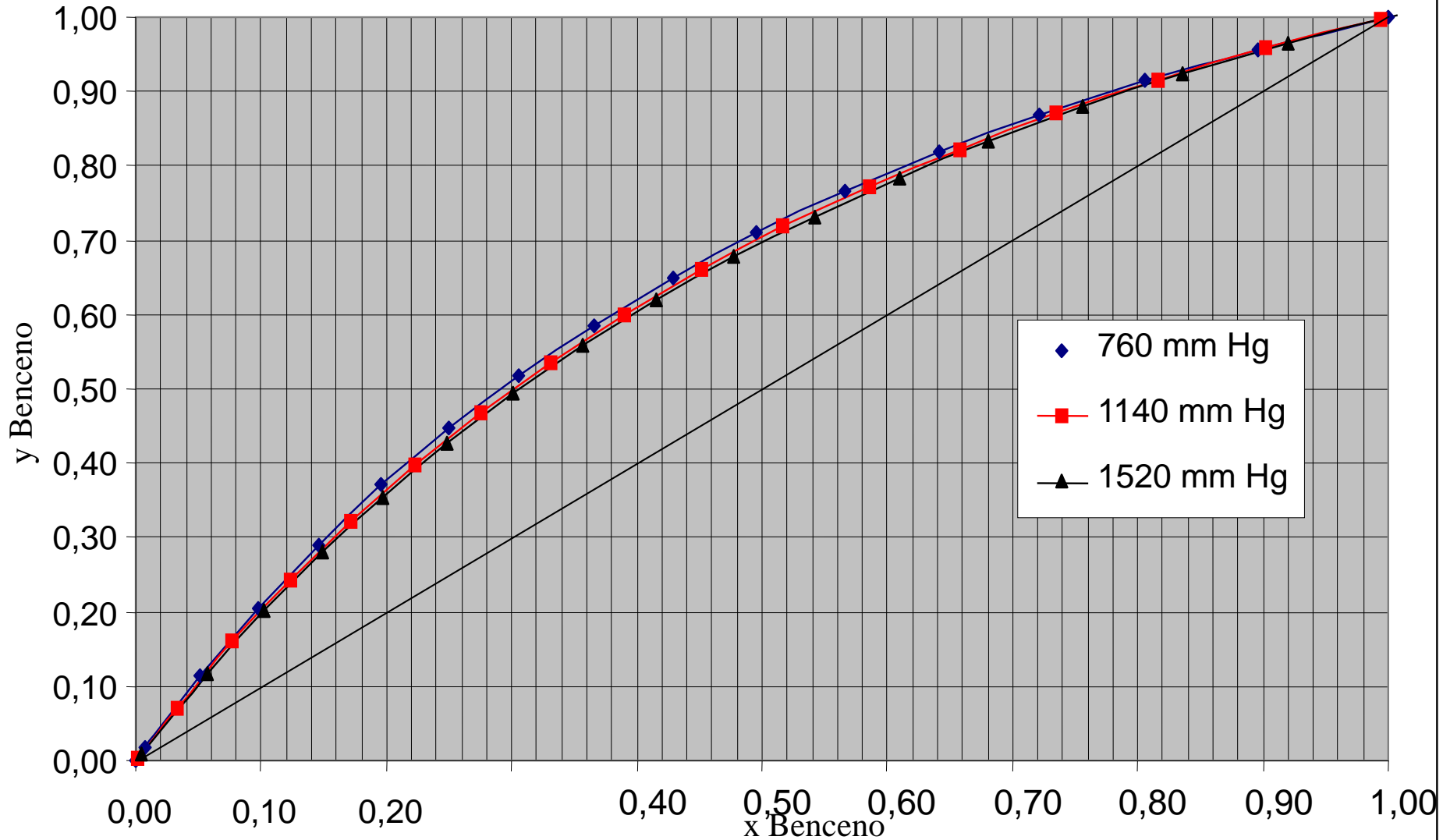
Problema Líquido-Vapor Mezcla Benceno-Tolueno

T-x-y Benceno-Tolueno @ 760,1140 y 1520 mmHg

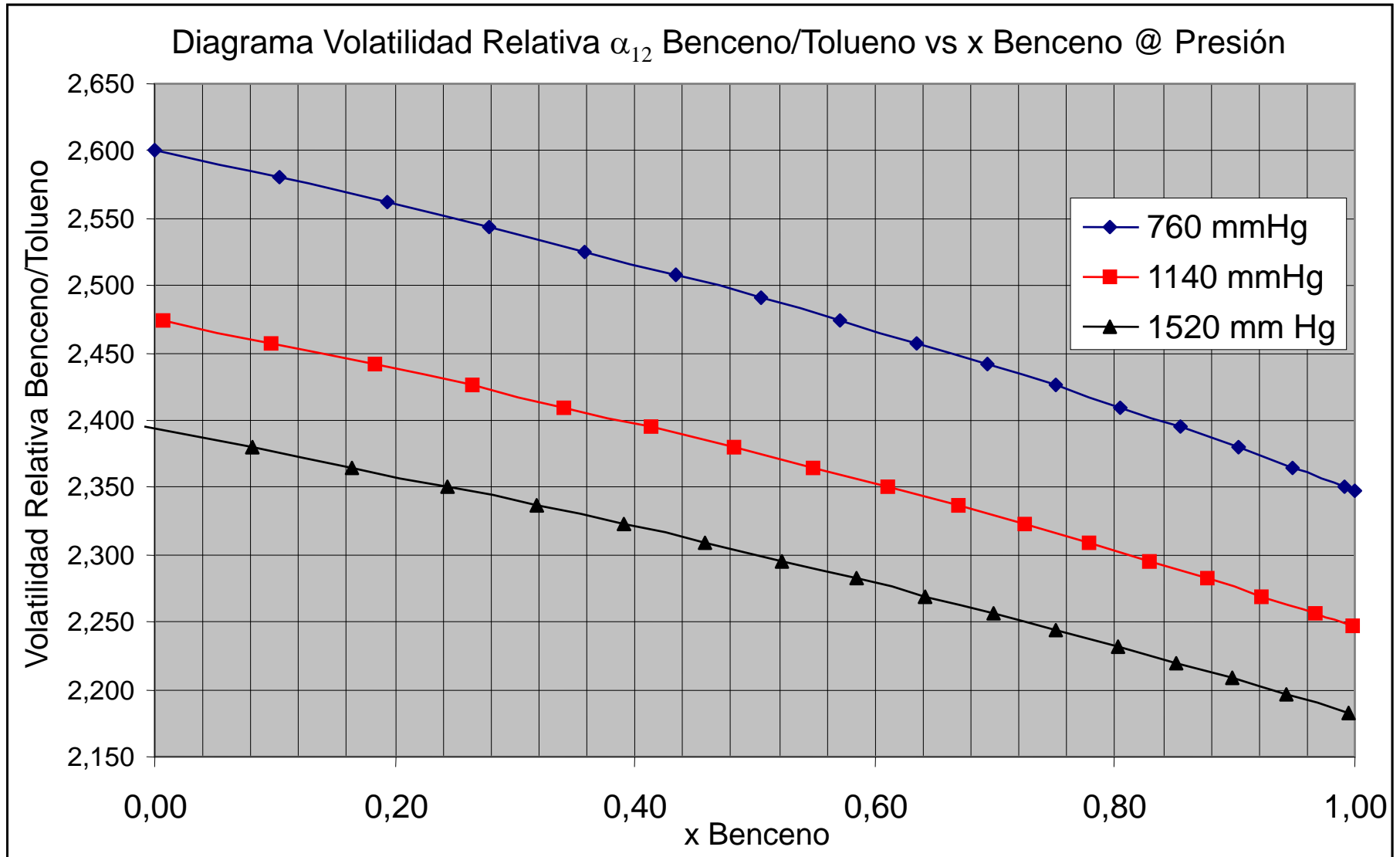


Problema Líquido-Vapor Mezcla Benceno-Tolueno

Diagrama x-y Benceno-Tolueno @ 760,1140 y 1570 mmHg

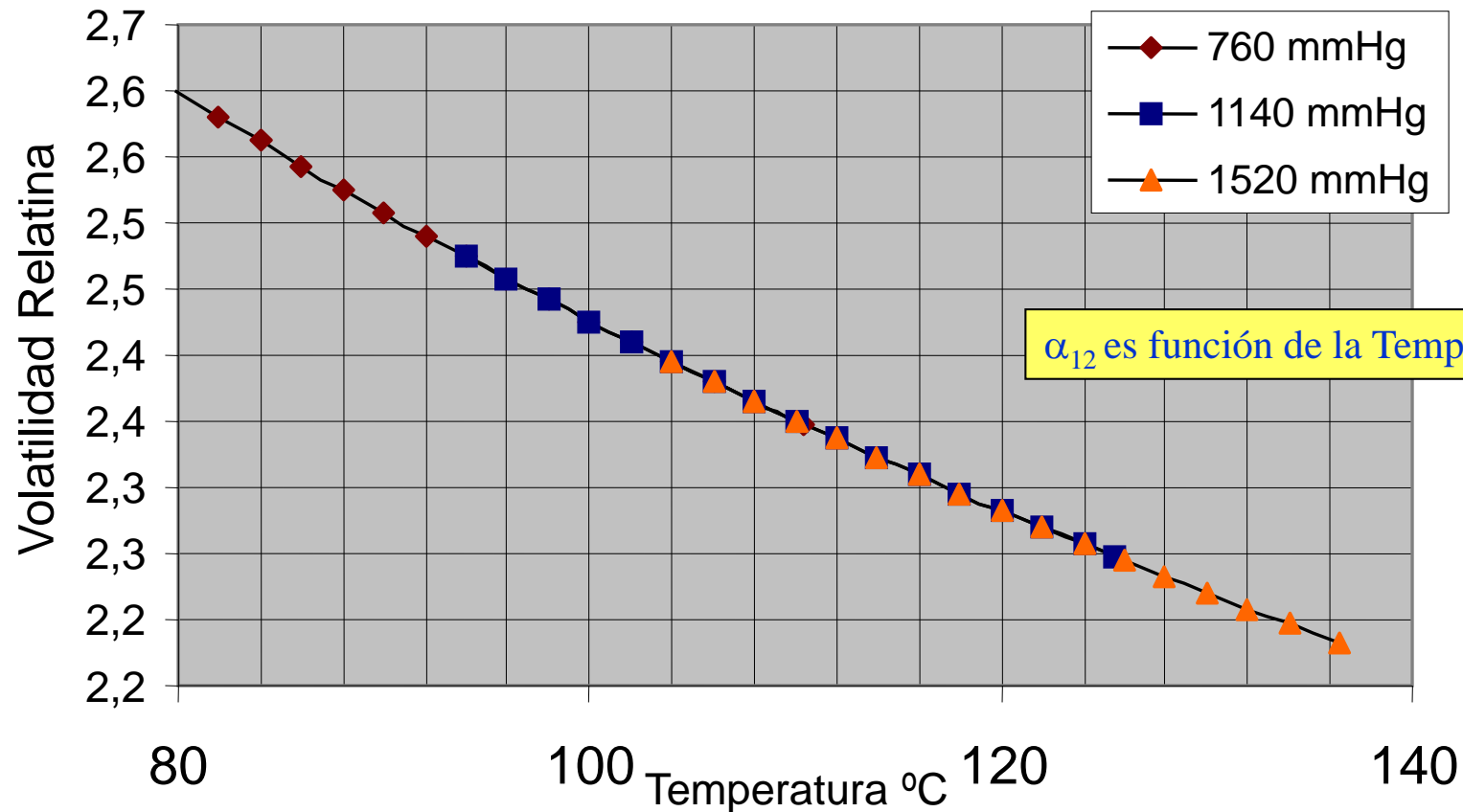


Problema Líquido-Vapor Mezcla Benceno-Tolueno



Problema Líquido-Vapor Mezcla Benceno-Tolueno

Volatilidad Relativa α_{12} vs Temperatura , Presión Sistema Benceno-Tolueno



α_{12} es función de la Temperatura

Destilación: Índice

1. Introducción
2. Equilibrio Líquido-Vapor
 - Componente puro
 - **Mezclas binarias**
 - Mezclas ideales. Modelos termodinámicos
 - **Mezclas reales. Modelos de coeficientes de actividad**
3. Flash Isotermo
 - Cálculo del flash
 - Sistema de control del flash
4. Condiciones de Burbuja y Rocío
 - Cálculo presión punto de burbuja
 - Cálculo temperatura punto de burbuja
 - Cálculo temperatura punto de rocío
 - Cálculo presión punto de rocío

Termodinámica Mezclas Reales Líquido-Vapor

MODELOS DE CALCULO: PROPIEDADES FISICAS Y MODELO DE EQUILIBRIO LIQUIDO-VAPOR

Criterio de Equilibrio: $T^V=T^L, P^V=P^L; f_i^V(T,P,y_i) = f_i^L(T,P,x_i)$	FASE VAPOR	FASE LIQUIDA
COMPORTAMIENTO IDEAL	<u>Ley de Dalton</u> $P_i = P y_i$	<u>Ley de Raoult</u> $P_i = x_i P_i^o$ (Vapores Condensables) <u>Ley de Henry</u> $P_i = x_i H_i$ (Disolución de gases, O ₂ en H ₂ O)
COMPORTAMIENTO NO IDEAL	<u>Coefficientes de Fugacidad</u> $f_i^V(T,P,y_1) = P y_i \phi_i^V$ f_i^V (fugacidad de i en la FV) ϕ_i^V (coeficiente de fugacidad i) Presiones “bajas” $\phi_i^V = 1$: Mezclas de gases no polares, $T \sim T_b$ del componente más pesado ; $P < 2 \text{ atm}$	<u>Coefficientes de actividad</u> $f_i^L(T,P,x_i) = x_i \gamma_i f_i^o$ γ_i (coeficiente de actividad de i) f_i^o (fugacidad de i líquido puro) Para Presiones “bajas” $f_i^L(T,P,x_i) = P_i^o x_i \gamma_i$ $f_1^L(T,P,x_1) = H_1 x_1 \gamma_1$

Para Presiones Bajas se puede asumir comportamiento ideal en la fase vapor y para la fase líquida se debe utilizar coeficiente de actividad: modelos de van Laar, Wilson, NRTL, UNIQUAC y Margules

$$P y_i = P_i^o x_i \gamma_i$$

$$K_i = y_i/x_i = P_i^o \gamma_i / P$$

Termodinámica Mezclas Líquido-Vapor

MODELO DE VAN LAAR

$$\ln \gamma_1 = \frac{A_{12}}{\left[1 + (x_1 A_{12}) / (x_2 A_{21})\right]^2}$$

$$\ln \gamma_2 = \frac{A_{21}}{\left[1 + (x_2 A_{21}) / (x_1 A_{12})\right]^2}$$

Cálculo de los Coeficientes de Interacción Binaria A_{12}, A_{21}

Dilución Infinita

$$A_{12} = \ln \gamma_1^\infty; \quad x_1 \rightarrow 0$$

$$A_{21} = \ln \gamma_2^\infty; \quad x_2 \rightarrow 0$$

Con datos experimentales L-V

$$A_{12} = \ln \gamma_1 \left(1 + \frac{x_2 \ln \gamma_2}{x_1 \ln \gamma_1}\right)^2$$

$$A_{21} = \ln \gamma_2 \left(1 + \frac{x_1 \ln \gamma_1}{x_2 \ln \gamma_2}\right)^2$$

$$\gamma_i = P y_i / P^\circ_i x_i$$

Para un azeótropo $x_i = y_i$, $K_i = 1$ entonces $\gamma_i = P / P^\circ_i$

Termodinámica Mezclas Líquido-Vapor

Modelo de coeficientes de actividad

Type of equation	Adjustable parameters	Equations in binary form
Margules	\bar{A}_{12} \bar{A}_{21}	$\ln \gamma_1 = [\bar{A}_{12} + 2(\bar{A}_{21} - \bar{A}_{12})x_1]x_2^2$ $\ln \gamma_2 = [\bar{A}_{21} + 2(\bar{A}_{12} - \bar{A}_{21})x_2]x_1^2$
van Laar	A_{12} A_{21}	$\ln \gamma_1 = A_{12} \left(\frac{A_{21}x_2}{A_{12}x_1 + A_{21}x_2} \right)^2$ $\ln \gamma_2 = A_{21} \left(\frac{A_{12}x_1}{A_{12}x_1 + A_{21}x_2} \right)^2$
Wilson	$\lambda_{12} - \lambda_{11}$ $\lambda_{21} - \lambda_{22}$	$\ln \gamma_1 = -\ln (x_1 + \Lambda_{12}x_2) + x_2 \left(\frac{\Lambda_{12}}{x_1 + \Lambda_{12}x_2} - \frac{\Lambda_{21}}{\Lambda_{21}x_1 + x_2} \right)$ $\ln \gamma_2 = -\ln (x_2 + \Lambda_{21}x_1) - x_1 \left(\frac{\Lambda_{12}}{x_1 + \Lambda_{12}x_2} - \frac{\Lambda_{21}}{\Lambda_{21}x_1 + x_2} \right)$

where $\Lambda_{12} = \frac{v_2^L}{v_1^L} \exp \left(- \frac{\lambda_{12} - \lambda_{11}}{RT} \right)$ $\Lambda_{21} = \frac{v_1^L}{v_2^L} \exp \left(- \frac{\lambda_{21} - \lambda_{22}}{RT} \right)$

v_i^L = molar volume of pure-liquid component i

λ_{ij} = interaction energy between components i and j , $\lambda_{ij} = \lambda_{ji}$

Problema Cálculo Equilibrio Mezclas Reales Líquido-Vapor

Conocidos los datos experimentales de equilibrio Líquido-vapor a 50°C del sistema Metanol, 1,2DicloroEtano, aplicando el modelo de van Laar para el cálculo de los coeficientes de actividad determinar los parámetros de interacción binaria del sistema y reproducir y extrapolar los datos de equilibrio considerando comportamiento real e ideal de la fase líquida

Datos de equilibrio:

50°C	Metanol	Metanol
p, mmHg	x1	y1
483,8	0,3	0,591
493,2	0,4	0,602
499,9	0,5	0,612
501,4	0,7	0,657
469,7	0,9	0,814

Datos Ctes. Antoine

Cte's P°	Metanol	1,2dicloroetano
A	18,5875	16,1764
B	3626,55	2927,17
C	-34,29	-50,22

Solución Cálculo Equilibrio Mezclas Reales Líquido-Vapor

$$A_{12} = \ln \gamma_1 \left(1 + \frac{x_2 \ln \gamma_2}{x_1 \ln \gamma_1} \right)^2$$

	Metanol	Metanol	Metanol	1,2dicloroetano				
p, mmHg	x1	y1	γ_1	γ_2	$\ln \gamma_1$	$\ln \gamma_2$	A12	A21
483,8	0,3	0,591	2,30118853	1,219923862	0,83342574	0,19878845	2,01925328	1,5549377
493,2	0,4	0,602	1,79217196	1,411875766	0,58342827	0,34491915	2,07699233	1,56143006
499,9	0,5	0,612	1,47735432	1,674119489	0,39025286	0,51528735	2,10120963	1,59135108
501,4	0,7	0,657	1,13624444	2,473994839	0,12772847	0,90583419	2,08408747	1,59995777
469,7	0,9	0,814	1,02570522	3,770292973	0,0253804	1,32715271	1,17706159	1,82331511

$$\gamma_i = P y_i / P^{\circ} i x_i$$

P ^o i	mmHg	414,171193	231,7172714
	atm	0,5449621	0,304891147
		Metanol	1,2dicloroetano

$$\ln P^{\circ} i = A - \frac{B}{T + C}$$

$$A_{21} = \ln \gamma_2 \left(1 + \frac{x_1 \ln \gamma_1}{x_2 \ln \gamma_2} \right)^2$$

A12 Media	A21 Media
2,070	1,577

Solución Cálculo Equilibrio Mezclas Reales Líquido-Vapor

$$\ln \gamma_1 = \frac{A_{12}}{[1 + (x_1 A_{12}) / (x_2 A_{21})]^2}$$

x1	ln γ_1	ln γ_2	y1 calculado	y1 calculado	Pp 1 Calc.	Pp2 Calc.	Pt calc.	Pt calc.	Pti
0,05	1,81139548	0,00658791	0,36380896	0,05945581	126,715271	221,586402	348,301673	240,839967	
0,1	1,57678351	0,02555812	0,48369634	0,09995037	200,432556	213,944273	414,376829	249,962664	
0,2	1,17355358	0,09629966	0,56751536	0,17551319	267,841414	204,113065	471,95448	268,208056	
0,3	0,84782961	0,20445458	0,59311039	0,25405504	290,074042	198,998563	489,072605	286,453448	483,8
0,4	0,58872935	0,34353817	0,6035999	0,33501731	298,484502	196,022709	494,507211	304,69884	493,2
0,5	0,38701339	0,50812178	0,61293186	0,416231	304,949321	192,576326	497,525647	322,944232	499,9
0,7	0,12538617	0,89628273	0,65862275	0,58100812	328,649102	170,345358	498,99446	359,435017	501,4
0,9	0,01260436	1,34044055	0,81002149	0,79987576	377,482134	88,5328284	466,014962	395,925801	469,7
			van Laar	Ideal	van Laar	van Laar	van Laar	Ideal	Experimental

$$y_i = \gamma_i P_i^o x_i / P$$

$$y_i = P_i^o x_i / P$$

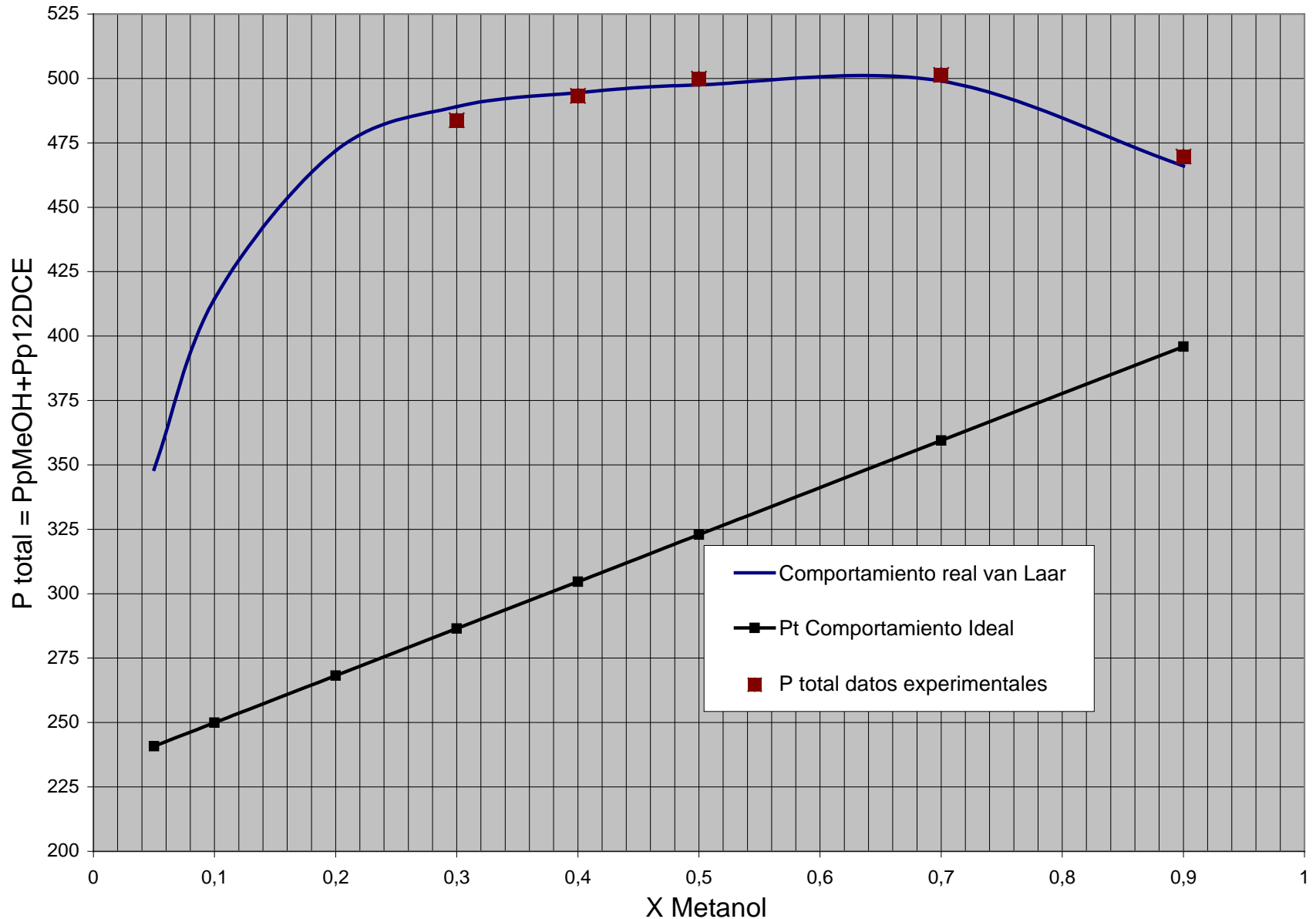
$$P_i^o x_i \gamma_i$$

$$P_t = \sum P_i^o x_i \gamma_i$$

$$P_t = \sum x_i P_i^o$$

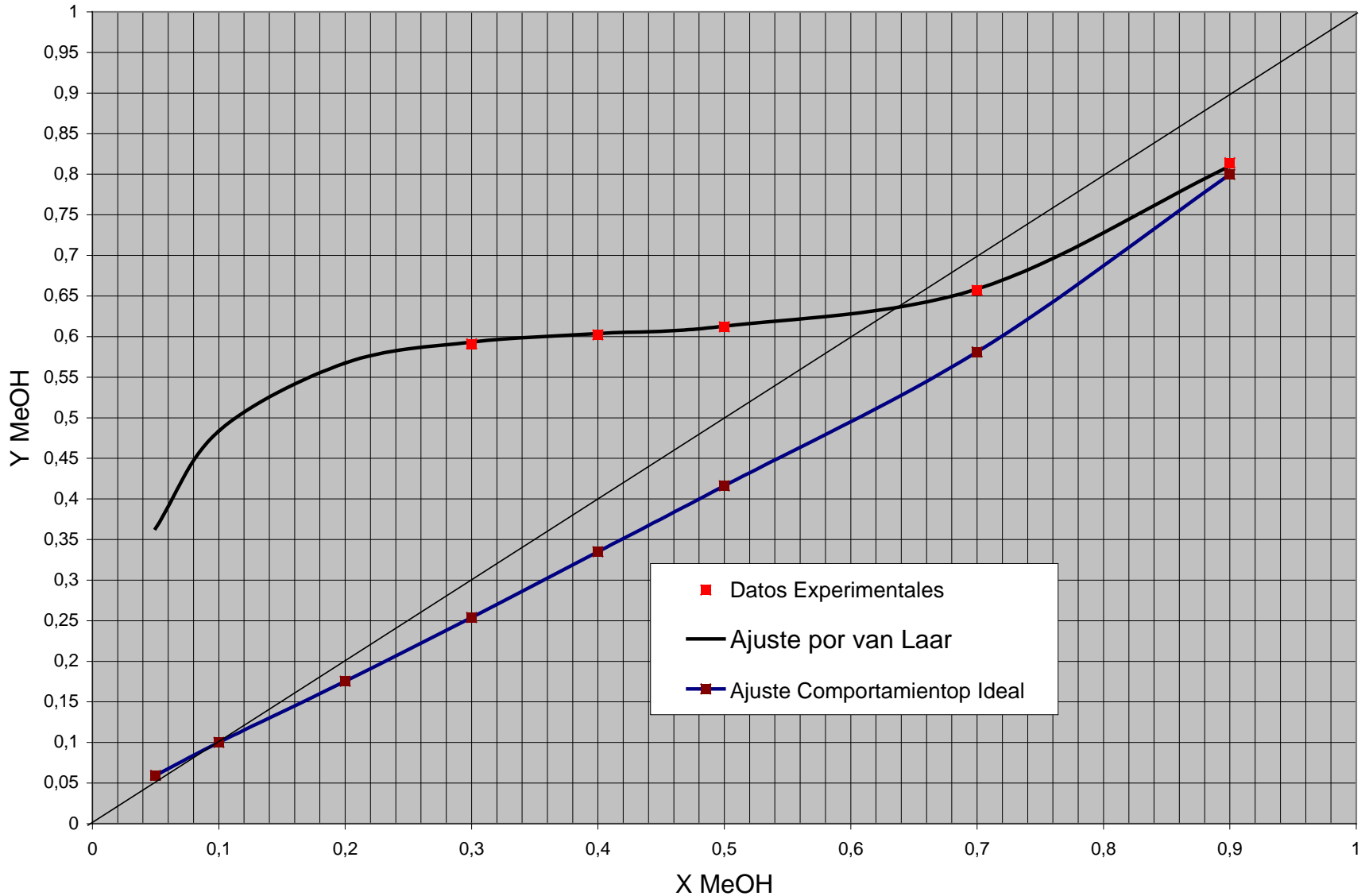
Solución Cálculo Equilibrio Mezclas Reales Líquido-Vapor

Presión total @ 50 °C vs X MeOH



Solución Cálculo Equilibrio Mezclas Reales Líquido-Vapor

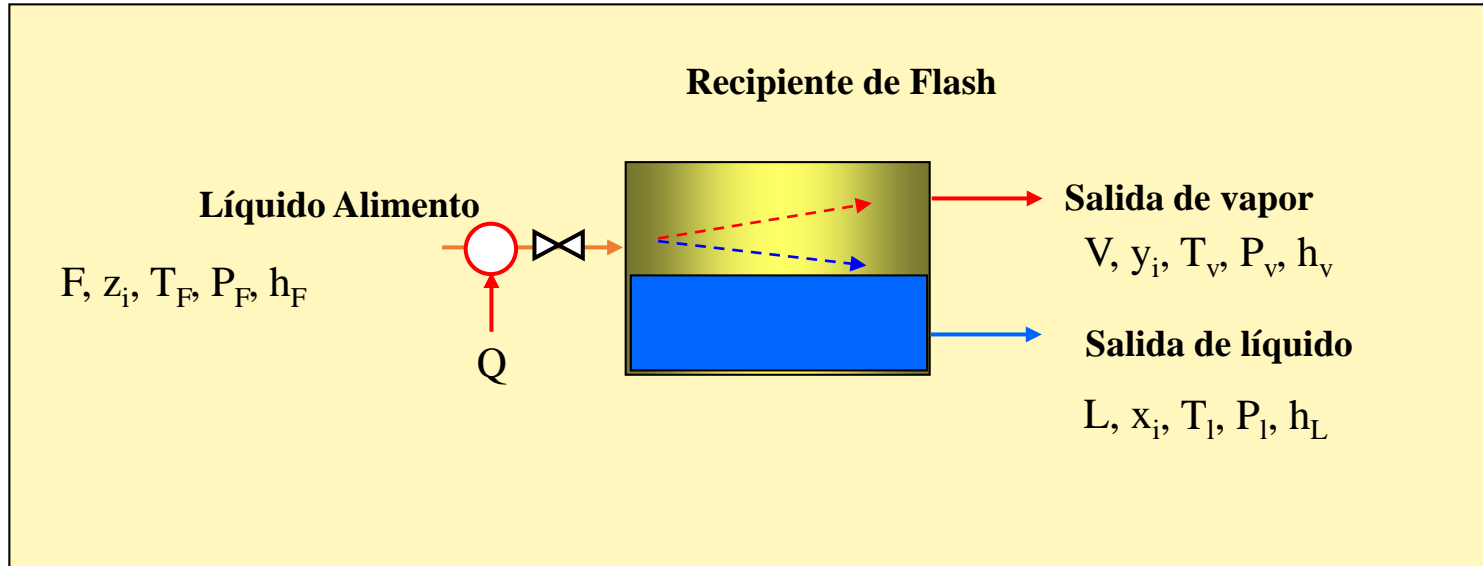
X vs Y MeOH-12DCE Expe-van Laar-Ideal



Destilación: Índice

1. Introducción
2. Equilibrio Líquido-Vapor
 - Componente puro
 - Mezclas binarias
 - Mezclas ideales. Modelos termodinámicos
 - Mezclas reales. Modelos de coeficientes de actividad
- 3. Flash Isotermo**
 - **Cálculo del flash**
 - Sistema de control del flash
4. Condiciones de Burbuja y Rocío
 - Cálculo presión punto de burbuja
 - Cálculo temperatura punto de burbuja
 - Cálculo temperatura punto de rocío
 - Cálculo presión punto de rocío

Configuración del Flash Isotermo



FLASH: **Proceso continuo** en el que una **corriente líquida** se alimenta a un recipiente cerrado vaporizándose parcialmente. La mezcla **Vapor y Líquido** en **equilibrio termodinámico** se separan y salen del recipiente

Para cada corriente:

n: caudales molares: F, L, V

z_i : composición: x, y, z

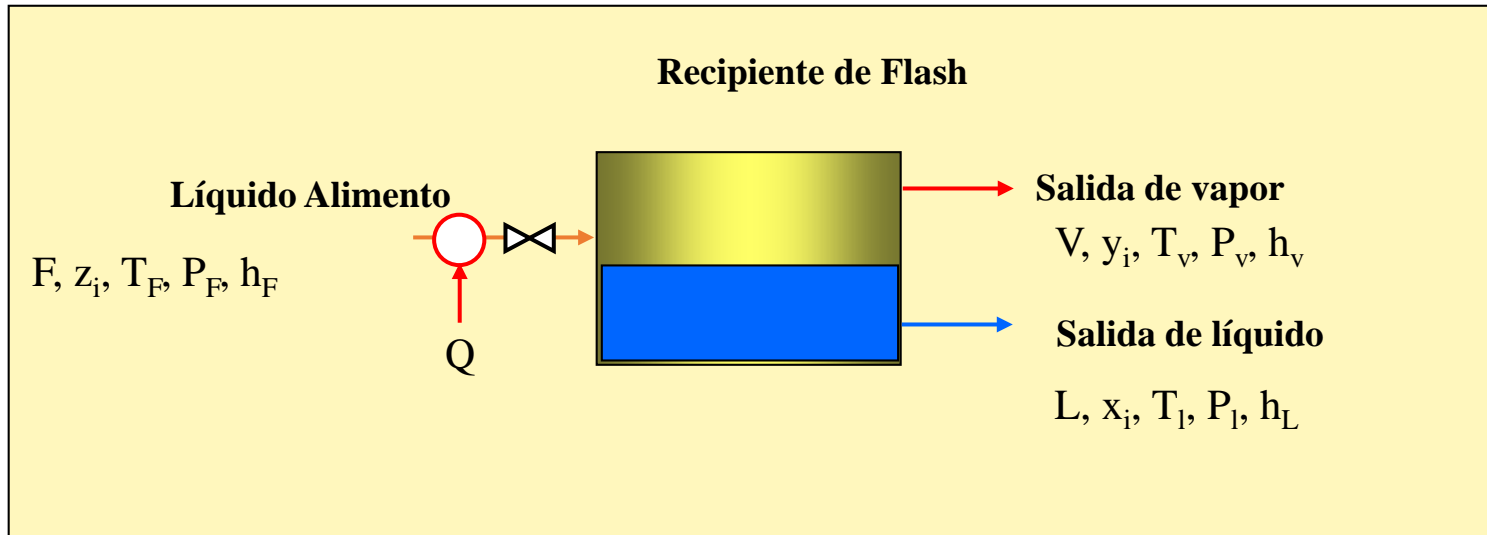
T: temperatura

P: presión

h: entalpía

Q: Calor aportado (Duty)

Variables del Flash Isotermo



Este sistema tiene **3C+10** Incógnitas

→ $F, T_F, P_F, V, L, T_l, T_v, P_l, P_v, Q, \{x_i, y_i, z_i\}_C$

Número de ecuaciones independientes

(2C + 5)

$\sum y_i = 1 ; \sum x_i = 1 ; F h_f + Q = V h_v + L h_l$ (B.de Energía)

(3)

$T_v = T_l = T, P_v = P_l = P$ (Equilibrio Térmico y Mecánico)

(2)

$K_i = y_i / x_i$ (R.de E.), $F z_i = V y_i + L x_i, i = 1$ a c (B.de M.)

(2C)

Se deben especificar **C+5** Variables

Las más frecuentes: $z_i (c), F, T_f, P_f$ **C+3**

Las 2 Especificaciones adicionales requeridas más frecuentes:

T,P	Flash isotermo
V/F=0, P	Temperatura de Burbuja
V/F=1, P	Temperatura de rocío
V/F=0, T	Presión de Burbuja
V/F=1, T	Presión de rocío
Q=0, P	Flash adiabático
Q, P	Flash no adiabático
V/F, P	Flash fracción vaporizada

Ecuaciones del Flash Isotermo

Equilibrio térmico y mecánico en el equipo de flash.

$$T_L = T_V = T$$

$$P_L = P_V = P$$

Balance Total de Materia:

$$F = V + L$$

Balance Individual de Componentes

$$FZ_i = VY_i + LX_i$$

Sumatorio de las Fracciones Molares , para cada corriente

$$\sum_i X_i = 1$$

$$\sum_i Y_i = 1$$

$$\sum_i Z_i = 1$$

Relaciones de equilibrio K_i para cada componente

$$k_i^{L,V} = \frac{Y_i^V}{X_i^L}$$

Método de Rachford Rice. Flash Isotermo

Se define la **Fracción Vaporizada** como:

$$\psi = \frac{V}{F}$$

Sustituyendo en el **balance total de materia** :

$$L = F - \psi F$$

Para cada balance **individual de materia**:

$$FZ_i = VY_i + LX_i \quad \longrightarrow \quad Z_i = \frac{V}{F} Y_i + \frac{F - \psi F}{F} X_i \quad \longrightarrow \quad Z_i = \psi Y_i + X_i - \psi X_i$$

Utilizando los valores de **K** , para la fracción molar en la fase líquida:

$$\begin{array}{l} Z_i = \psi Y_i + X_i - \psi X_i \quad \longrightarrow \quad Z_i = \psi K_i X_i + X_i - \psi X_i \quad \longrightarrow \quad X_i = \frac{Z_i}{\psi K_i + 1 - \psi} \\ \uparrow \\ Y_i = K_i X_i \quad \longrightarrow \quad Y_i = \frac{K_i Z_i}{\psi K_i + 1 - \psi} \end{array}$$

Ecuación de Rachford Rice

Teniendo en cuenta los sumatorios de las fracciones molares:

$$\sum_i X_i = 1 \quad \sum_i Y_i = 1 \quad \longrightarrow \quad \sum_i (Y_i - X_i) = 0$$

Sustituyendo en las expresiones de las fracciones molares:

$$X_i = \frac{Z_i}{\psi K_i + 1 - \psi} \quad Y_i = \frac{K_i Z_i}{\psi K_i + 1 - \psi}$$

Se llega a la ecuación de **Rachford-Rice** :

$$\sum_i \left(\frac{K_i Z_i}{\psi K_i + 1 - \psi} - \frac{Z_i}{\psi K_i + 1 - \psi} \right) = 0 \quad \longrightarrow \quad f(\psi) = \sum_i \frac{Z_i (K_i - 1)}{\psi K_i + 1 - \psi} = 0$$

Las raíces de la ecuación solucionan las **composiciones y la fracción vaporizada** de la operación del Flash

Se soluciona mediante dos métodos:

- **Iterativo** : dando valores a ψ entre 0 y 1
- **Gráfico**

Método Iterativo de Newton

Se puede resolver la ecuación de Rachford-Rice mediante el método de Newton's y determinar el valor de ψ :

El método de Newton establece que la mejor solución , utilizando la última estimación es :

$$\Psi^{k+1} = \Psi^k - \frac{f(\Psi^k)}{f'(\Psi^k)}$$

Que para la ecuación de Rachford-Rice tiene la expresión:

$$\psi^{k+1} = \psi^k + \frac{\sum_i \frac{Z_i(K_i - 1)}{\psi^k (K_i - 1) + 1}}{\sum_i \frac{Z_i(K_i - 1)^2}{(\psi^k (K_i - 1) + 1)^2}}$$

Método de Rachford-Rice

1: $T_L = T_V$ Equilibrio Térmico

2: $P_L = P_V$ Equilibrio Mecánico

3 Solucionar Rachford-Rice determinando V/F donde los valores de K se determinan mediante datos de entrada (tablas, ecuaciones, gráficos, etc) @ T, y P.

$$\sum_i \frac{Z_i(K_i - 1)}{\psi K_i + 1 - \psi} = 0$$

Se puede utilizar el método de Newton

4: $V = F\psi$ Calcular V

5 y 6: $X_i = \frac{Z_i}{\psi K_i + 1 - \psi}$ $Y_i = \frac{K_i Z_i}{\psi K_i + 1 - \psi}$

7: $L = F - \psi F$ Calcular L

8: $Q = Vh_v + Lh_l - Fh_f$ Calcular Q

Problema : Rachford-Rice

En un recipiente de flash operando a 50° y 200kPa se separan 1000 kg moles/hr de una corriente que contiene 30 % molar de propano, 10 % de n-butano, 15 % n-pentano, y 45 % n-hexano.

Cuales son las composiciones y caudales de las corrientes de salida del flash?

1) Utilizando las cartas de **Depriester** se obtiene que :

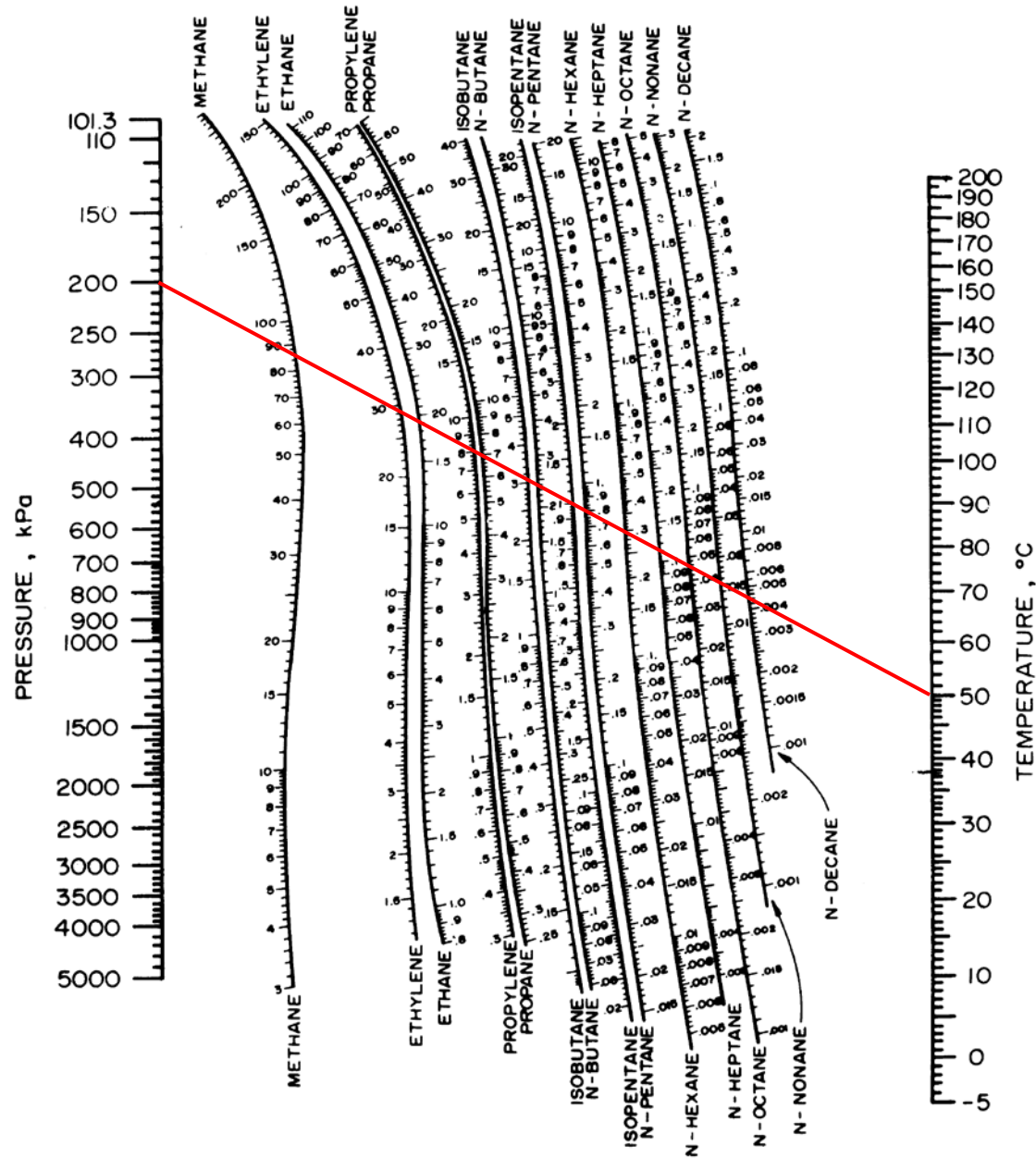
$$\begin{aligned}K_1 (\text{propano}) &= 7.0 \\K_2 (\text{n-butano}) &= 2.4 \\K_3 (\text{n-pentano}) &= 0.80 \\K_4 (\text{n-hexano}) &= 0.30\end{aligned}$$

2) Sustituyendo en la ecuación de Rachford-Rice las composiciones y los valores K:

$$f\left(\frac{V}{F}\right) = \sum_i \frac{Z_i(K_i - 1)}{\psi(K_i - 1) + 1}$$

$$f\left(\frac{V}{F}\right) = \frac{0.3(7.0-1)}{\psi(7.0-1)+1} + \frac{0.1(2.4-1)}{\psi(2.4-1)+1} + \frac{0.15(0.8-1)}{\psi(0.8-1)+1} + \frac{0.45(0.3-1)}{\psi(0.3-1)+1}$$

Depriester: Determinación de los valores de K



Problema : Rachford-Rice. Método de Newton

Podemos representar la ecuación de Rachford-Rice como función de V/F o utilizar el método de Newton:

$$f\left(\frac{V}{F}\right) = \sum_i \frac{Z_i(K_i - 1)}{\psi(K_i - 1) + 1}$$

$$f\left(\frac{V}{F}\right) = \frac{0.3(7.0 - 1)}{\psi(7.0 - 1) + 1} + \frac{0.1(2.4 - 1)}{\psi(2.4 - 1) + 1} + \frac{0.15(0.8 - 1)}{\psi(0.8 - 1) + 1} + \frac{0.45(0.3 - 1)}{\psi(0.3 - 1) + 1}$$

Como primera estimación... V/F=0.1

$$f(0.1) = \frac{0.3(7.0 - 1)}{0.1(7 - 1) + 1} + \frac{0.1(2.4 - 1)}{0.1(2.4 - 1) + 1} + \frac{0.15(0.8 - 1)}{0.1(0.8 - 1) + 1} + \frac{0.45(0.3 - 1)}{0.1(0.3 - 1) + 1} = 0.8785$$

Para obtener el nuevo valor de la ecuación RR :

$$f'\left(\frac{V}{F}\right) = \frac{0.3(7.0 - 1)^2}{[\psi(7 - 1) + 1]^2} + \frac{0.1(2.4 - 1)^2}{[\psi(2.4 - 1) + 1]^2} + \frac{0.15(0.8 - 1)^2}{[\psi(0.8 - 1) + 1]^2} + \frac{0.45(0.3 - 1)^2}{[\psi(0.3 - 1) + 1]^2}$$

$$f'(0.1) = \frac{0.3(7.0 - 1)^2}{[0.1(7 - 1) + 1]^2} + \frac{0.1(2.4 - 1)^2}{[0.1(2.4 - 1) + 1]^2} + \frac{0.15(0.8 - 1)^2}{[0.1(0.8 - 1) + 1]^2} + \frac{0.45(0.3 - 1)^2}{[0.1(0.3 - 1) + 1]^2} = 4.631$$

Problema : Rachford-Rice.Método de Newton

La estimación es

$$\psi^2 = 0.1 + \frac{0.879}{4.631} = 0.29$$

$$f(0.29) = \frac{0.3(7.0 - 1)}{0.29(7 - 1) + 1} + \frac{0.1(2.4 - 1)}{0.29(2.4 - 1) + 1} + \frac{0.15(0.8 - 1)}{0.29(0.8 - 1) + 1} + \frac{0.45(0.3 - 1)}{0.29(0.3 - 1) + 1} = 0.329$$

Para obtener un nuevo valores, volvemos a derivar RR en:

$$f'(0.29) = \frac{0.3(7.0 - 1)^2}{[0.29(7 - 1) + 1]^2} + \frac{0.1(2.4 - 1)^2}{[0.29(2.4 - 1) + 1]^2} + \frac{0.15(0.8 - 1)^2}{[0.29(0.8 - 1) + 1]^2} + \frac{0.45(0.3 - 1)^2}{[0.29(0.3 - 1) + 1]^2} = 1.891$$

$$\psi^3 = 0.29 + \frac{0.329}{1.891} = 0.46$$

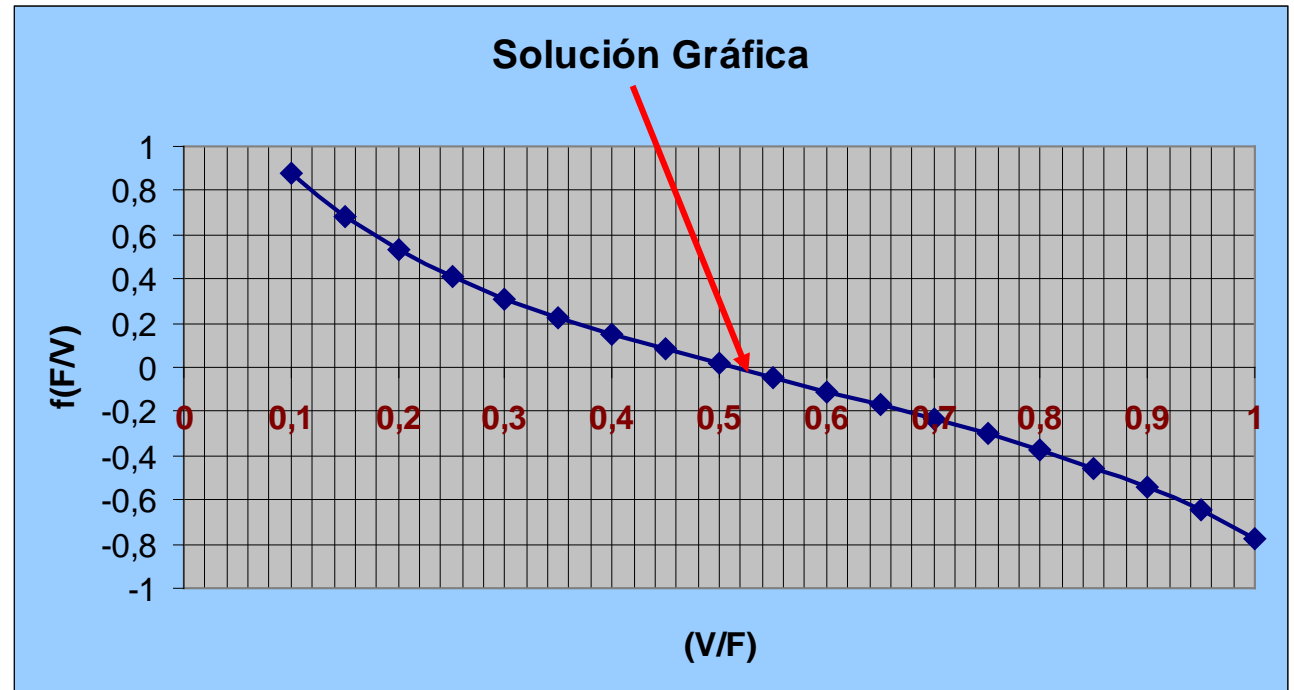
$$f(0.46) = 0.066 \quad f'(0.46) = 1.32$$

$$\psi^4 = 0.46 + \frac{0.066}{1.32} = 0.51$$

$$f(0.51) = 0.00173$$

Problema : Rachford-Rice. Método Gráfico

V/F	F(V/F)
0,1	0,8784851
0,15	0,68018776
0,2	0,53002775
0,25	0,41030657
0,3	0,31079962
0,35	0,22512829
0,4	0,14904666
0,45	0,07955501
0,5	0,01440422
0,55	-0,04820229
0,6	-0,10980305
0,65	-0,17181904
0,7	-0,23566986
0,75	-0,3028866
0,8	-0,37524081
0,85	-0,45491345
0,9	-0,54473981
0,95	-0,64859299
1	-0,77202381



Problema : Rachford-Rice

$$V/F = 0.51$$

$$V = 510 \text{ kgmol / hr}$$

Utilizando:

$$X_i = \frac{Z_i}{\psi K_i + 1 - \psi}$$

$$Y_i = \frac{K_i Z_i}{\psi K_i + 1 - \psi}$$

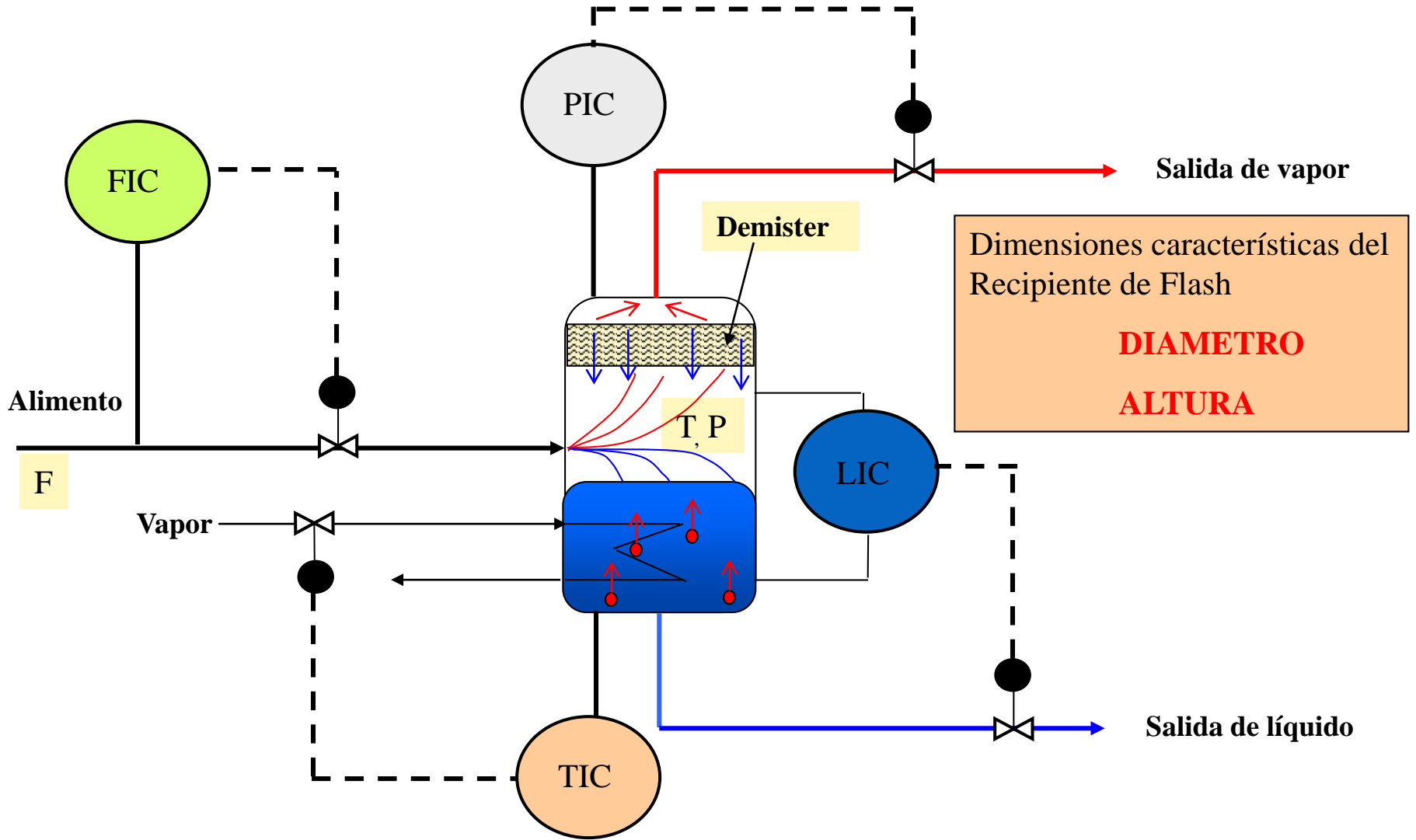
$$\begin{aligned} X_1 (\text{propano}) &= 0.0739 \\ X_2 (\text{n-butano}) &= 0.0583 \\ X_3 (\text{n-pentano}) &= 0.1670 \\ X_4 (\text{n-hexano}) &= 0.6998 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Y_1 (\text{propano}) &= 0.5172 \\ Y_2 (\text{n-butano}) &= 0.1400 \\ Y_3 (\text{n-pentano}) &= 0.1336 \\ Y_4 (\text{n-hexano}) &= 0.2099 \end{aligned}$$

Destilación: Índice

1. Introducción
2. Equilibrio Líquido-Vapor
 - Componente puro
 - Mezclas binarias
 - Mezclas ideales. Modelos termodinámicos
 - Mezclas reales. Modelos de coeficientes de actividad
- 3. Flash Isotermo**
 - Cálculo del flash
 - **Sistema de control del flash**
4. Condiciones de Burbuja y Rocío
 - Cálculo presión punto de burbuja
 - Cálculo temperatura punto de burbuja
 - Cálculo temperatura punto de rocío
 - Cálculo presión punto de rocío

Sistema de Control de un Flash



Etapas Diseño y Dimensionado de un Recipiente FLASH

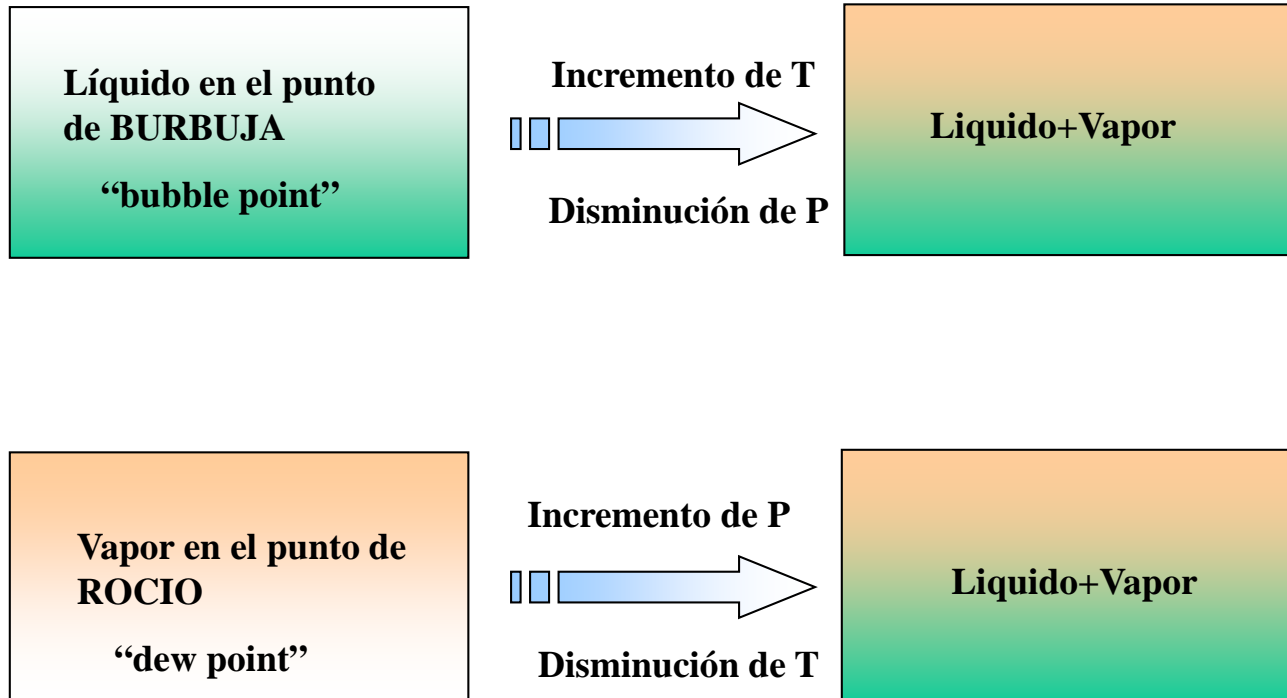
- Cálculo Termodinámico y Balances Globales e Individuales
 - F, L, V, P, T, Q, x_i, y
- Calcular la Velocidad Máxima del vapor dentro del recipiente en las condiciones de operación
- Calcular el Diámetro Mínimo
- Calcular la altura total como suma de la altura de líquido y de la fase vapor, incluyendo el Demister

Destilación: Índice

1. Introducción
2. Equilibrio Líquido-Vapor
 - Componente puro
 - Mezclas binarias
 - Mezclas ideales. Modelos termodinámicos
 - Mezclas reales. Modelos de coeficientes de actividad
3. Flash Isotermo
 - Cálculo del flash
 - Sistema de control del flash
4. **Condiciones de Burbuja y Rocío**
 - **Cálculo presión punto de burbuja**
 - **Cálculo temperatura punto de burbuja**
 - **Cálculo temperatura punto de rocío**
 - **Cálculo presión punto de rocío**

Condiciones de Burbuja y de Rocio

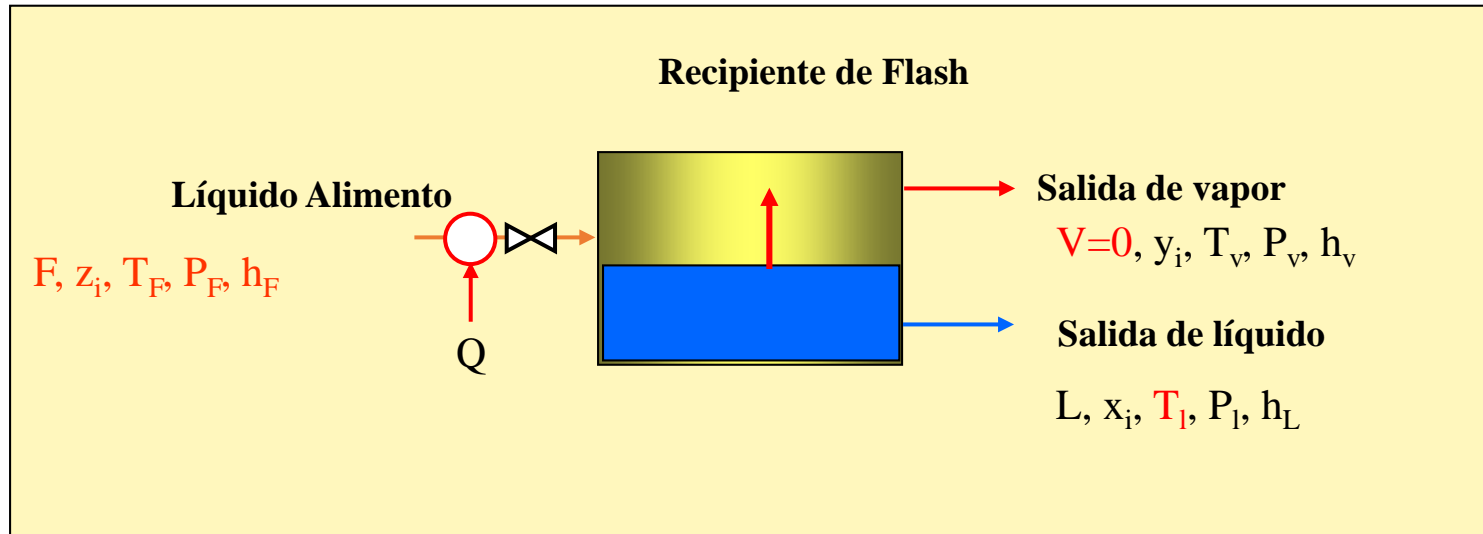
ES UN FENOMENO FISICO.....CON CAMBIO DE ESTADO



Cálculo Presión del Punto de Burbuja

Es la Presión a la que la mezcla líquida , a una temperatura determinada , comienza a hervir

Para el cálculo de la presión en el punto de burbuja se especifica F, z_i, T_F, P_F, T_L y $V=0$



En el punto de burbuja hay equilibrio termodinámico entre el líquido y el vapor ,pero el sistema está completamente en fase líquida , la fracción vaporizada ψ es CERO

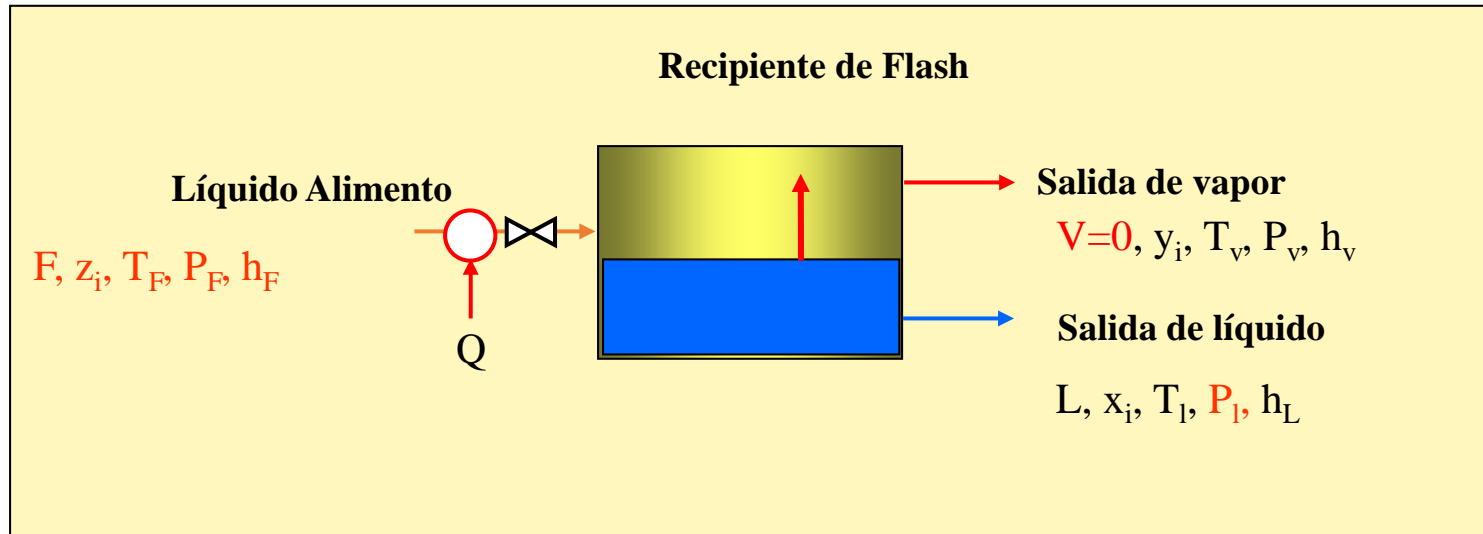
$$f(\psi) = \sum_i \frac{Z_i(K_i - 1)}{\psi K_i + 1 - \psi} = 0$$

$$f(0) = \sum_i Z_i(K_i - 1) = 0 \implies \sum_i Z_i K_i = 1$$

Cálculo Temperatura del Punto de Burbuja

Es la Temperatura (T_b) a la que la mezcla líquida, a una presión determinada, comienza a hervir

Para el cálculo de la temperatura en el punto de burbuja se especifica F , z_i , T_F , P_F , P_L y $V=0$



En el punto de burbuja hay equilibrio termodinámico entre el líquido y el vapor ,pero el sistema está completamente en fase líquida , **la fracción vaporizada ψ es CERO**

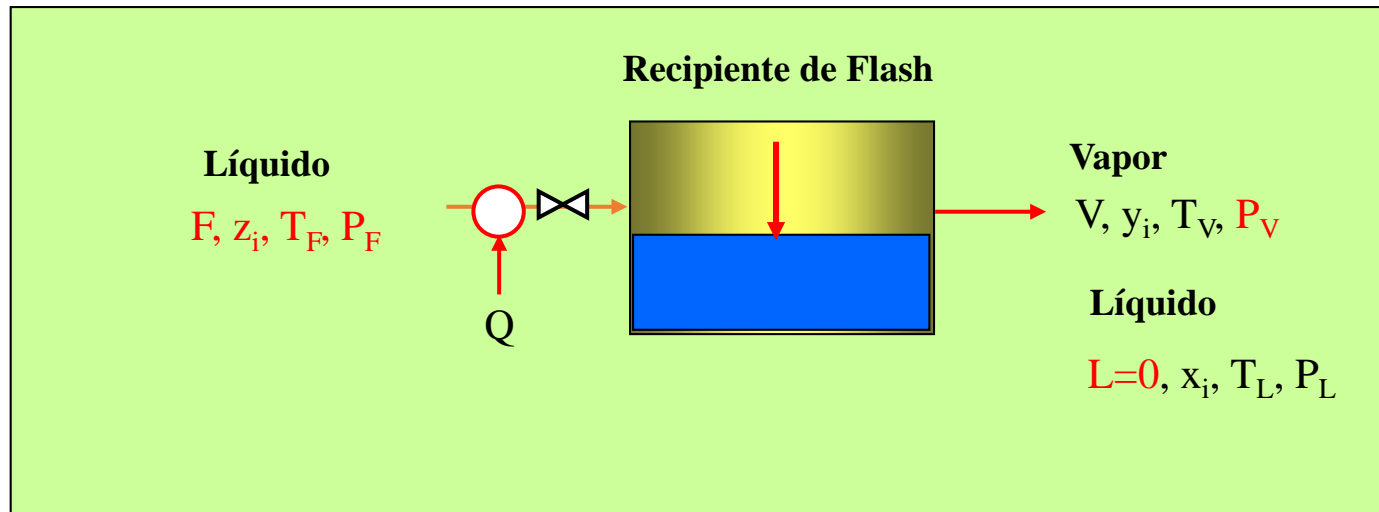
$$f(\psi) = \sum_i \frac{Z_i(K_i - 1)}{\psi K_i + 1 - \psi} = 0$$

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

Cálculo de la Temperatura del Punto de Rocío

Es la Temperatura (T_d) a la que la mezcla vapor, a una presión determinada, comienza a condensar

Para calcular la temperatura de Rocío se especifica F, z_i, T_F, P_F, P_V y $L=0$



En el punto de rocío hay equilibrio termodinámico entre el líquido y el vapor ,pero el sistema está completamente vaporizado , **la fracción vaporizada ψ es la UNIDAD**

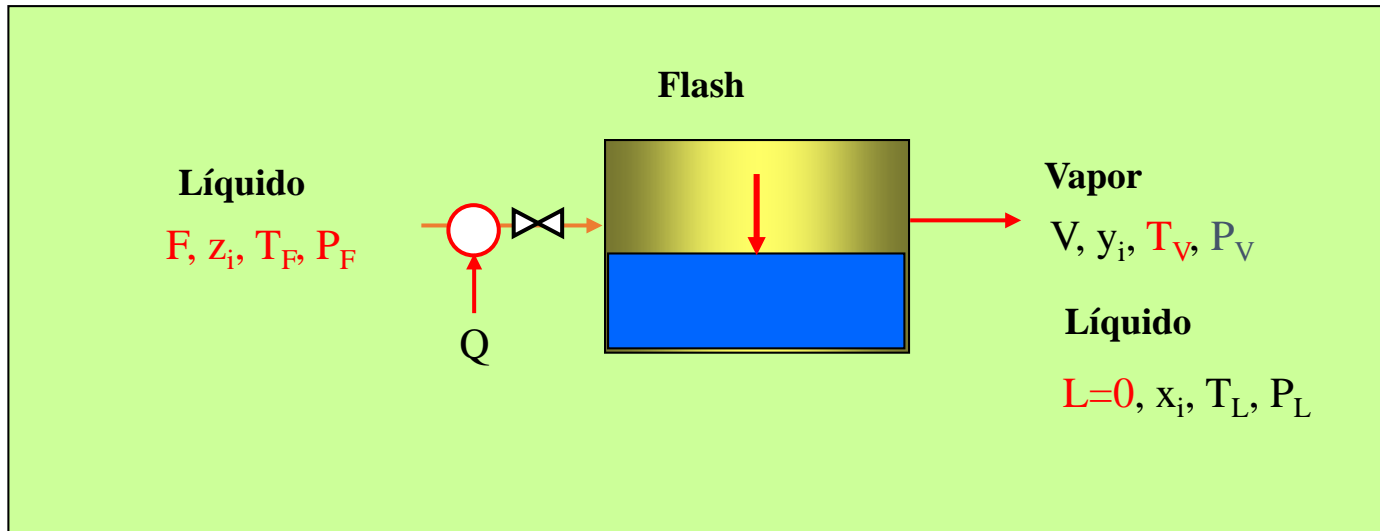
$$f(\psi) = \sum_i \frac{Z_i(K_i - 1)}{\psi K_i + 1 - \psi} = 0$$

$$f(1) = \sum_i \frac{Z_i(K_i - 1)}{K_i} = 0 \quad \rightarrow \quad \sum_i \frac{Z_i}{K_i} = 1$$

Cálculo de la Presión del Punto de Rocío

Es la Presión a la que la mezcla vapor, a una temperatura determinada, comienza a condensar

Para calcular la Presión de Rocío se especifica F, z_i, T_F, P_F, T_V y $L=0$



En el punto de rocío hay equilibrio termodinámico entre el líquido y el vapor ,pero el sistema está completamente vaporizado , **la fracción vaporizada ψ es la UNIDAD**

$$f(\psi) = \sum_i \frac{Z_i(K_i - 1)}{\psi K_i + 1 - \psi} = 0$$

$$f(1) = \sum_i \frac{Z_i(K_i - 1)}{K_i} = 0 \quad \implies \quad \sum_i \frac{Z_i}{K_i} = 1$$

Cálculo Punto de Burbuja y de Rocío

Para solucionar problemas de punto de rocío o de burbuja debemos determinar la Temperatura o la Presión que satisfacen las ecuaciones de Rachford Rice .

Punto de Burbuja

$$\sum_i Z_i K_i = 1$$

Punto de Rocío

$$\sum_i \frac{Z_i}{K_i} = 1$$

Método de cálculo para determinar la temperatura del punto de Burbuja o de Rocío :

- 1: Estimar una temperatura.
- 2: Determinar a la presión establecida y la temperatura estimada los valores de K en las cartas de DePriester
- 3: Calcular las expresiones de Rachford Rice apropiadas para las condiciones de equilibrio.
- 4: Estimar una nueva temperatura superior si el valor de K debiera ser superior y viceversa.
- 5: Repetir las etapas 3 y 4 hasta conseguir satisfacer las ecuaciones de Rachford Rice

Método de cálculo para determinar la Presión del punto de Burbuja o de Rocío :

- 1: Estimar una presión
- 2: Determinar a la presión estimada y la temperatura establecida los valores de K en las cartas de DePriester
- 3: Calcular las expresiones de Rachford Rice apropiadas para las condiciones de equilibrio.
- 4: Estimar una nueva presión menor si el valor de K debiera ser mayor y viceversa .
- 5: Repetir las etapas 3 y 4 hasta conseguir satisfacer las ecuaciones de Rachford Rice

Problema : Rachford-Rice

Un flash que opera a 80°C y 500kPa se alimentan 1000 kg moles/hr de una corriente con la siguiente composición molar: 10 % etano , 5 % propano , 15 % n-butano, 10 % n-pentano, 12 % isopentano, 8 % n-hexano, 30 % heptano y 10% nonano.

Determinar los caudales y composiciones a la salida del flash

De la carta DePriester :

K_1 (etano) = 11.0
K_2 (propano) = 4.6
K_3 (n-butano) = 1.85
K_4 (n-pentano) = 0.75
K_5 (isopentano) = 0.9
K_6 (n-hexano) = 0.32
K_7 (heptano) = 0.14
K_8 (nonano) = 0.026

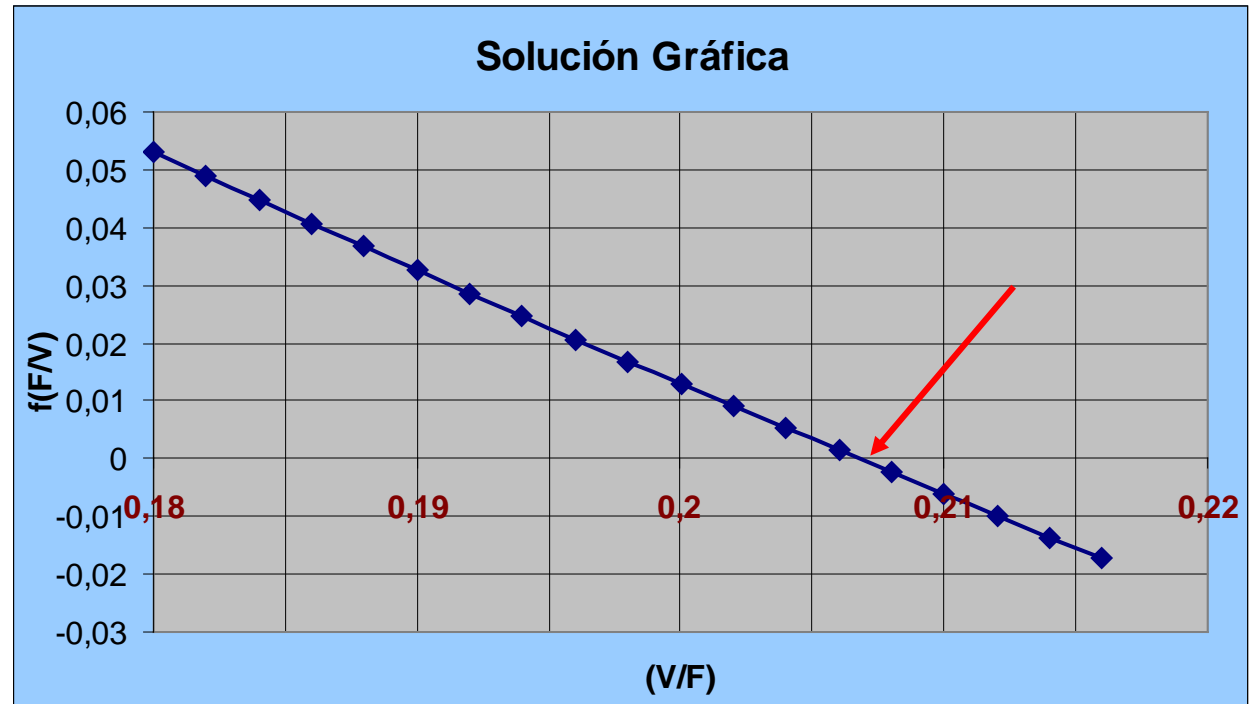
$V/F=0.207$
 $V=207\text{ kg mol/hr}$
 $L=793\text{ kg mol/hr}$

x_1 (etano) = 0.033	y_1 (etano) = 0.358
x_2 (propano) = 0.029	y_2 (propano) = 0.132
x_3 (n-butano) = 0.128	y_3 (n-butano) = 0.236
x_4 (n-pentano) = 0.123	y_4 (n-pentano) = 0.11
x_5 (isopentano) = 0.105	y_5 (isopentano) = 0.079
x_6 (n-hexano) = 0.093	y_6 (n-hexano) = 0.03
x_7 (heptano) = 0.365	y_7 (heptano) = 0.051
x_8 (nonano) = 0.125	y_8 (nonano) = 0.003

Problema : Rachford-Rice, Continuación

$$f(\psi) = \sum_i \frac{Z_i(K_i - 1)}{\psi K_i + 1 - \psi} = 0$$

V/F	F(V/F)
0,18	0,05320243
0,182	0,04901707
0,184	0,04486779
0,186	0,04075377
0,188	0,03667418
0,19	0,03262826
0,192	0,02861522
0,194	0,02463433
0,196	0,02068484
0,198	0,01676605
0,2	0,01287727
0,202	0,00901781
0,204	0,00518701
0,206	0,00138424
0,208	-0,00239115
0,21	-0,00613976
0,212	-0,0098622
0,214	-0,01355905
0,216	-0,01723089



V/F=0.207
 V=207 kg/hr
 L=793 kg/hr

Problema : Rachford-Rice, Continuación

$V/F=0.207$
 $V=207$ kg/hr
 $L=793$ kg/hr

z_1 (etano) = 0,1
 z_2 (propano) = 0,05
 z_3 (n-butano) = 0,15
 z_4 (n-pentano) = 0,1
 z_5 (isopentano) = 0,12
 z_6 (n-hexano) = 0,08
 z_7 (heptano) = 0,30
 z_8 (nonano) = 0,10

K_1 (etano) = 11.0
 K_2 (propano) = 4.6
 K_3 (n-butano) = 1.85
 K_4 (n-pentano) = 0.75
 K_5 (isopentano) = 0.9
 K_6 (n-hexano) = 0.32
 K_7 (heptano) = 0.14
 K_8 (nonano) = 0.026

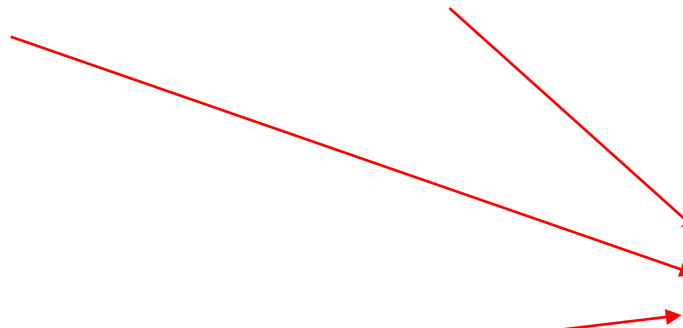
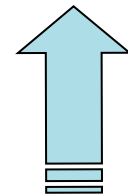
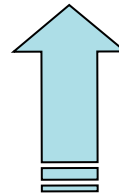
x_1 (etano) = 0.033
 x_2 (propano) = 0.029
 x_3 (n-butano) = 0.128
 x_4 (n-pentano) = 0.123
 x_5 (isopentano) = 0.105
 x_6 (n-hexano) = 0.093
 x_7 (heptano) = 0.365
 x_8 (nonano) = 0.125

y_1 (etano) = 0.358
 y_2 (propano) = 0.132
 y_3 (n-butano) = 0.236
 y_4 (n-pentano) = 0.11
 y_5 (isopentano) = 0.079
 y_6 (n-hexano) = 0.03
 y_7 (heptano) = 0.051
 y_8 (nonano) = 0.003

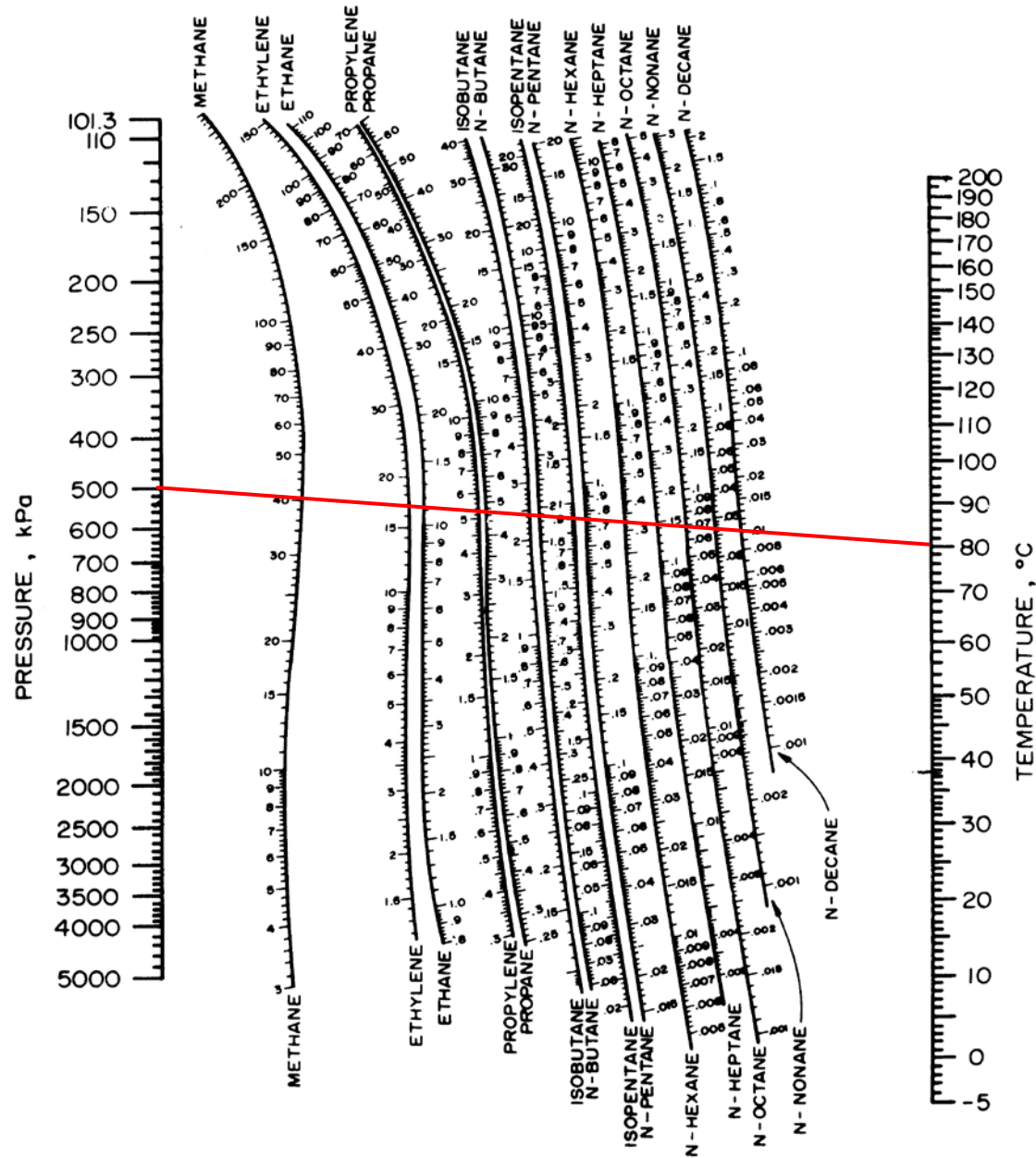
$$\psi = \frac{V}{F}$$

$$X_i = \frac{Z_i}{\psi K_i + 1 - \psi}$$

$$Y_i = K_i X_i$$



Depriester: determinación de los valores de K



Problema : Temperatura de Rocío

Un Flash que opera en el punto de rocío a 400 kPa , el producto de cabeza (el vapor) tiene la siguiente composición molar: 35 % n-butano, 30 % n-pentano, 15 % n-hexano, 20 % heptano. Determinar la temperatura de operación del flash y la composición del líquido .

De la carta de Depriester :

T=

K_1 (n-butane) =

K_2 (n-pentane) =

K_3 (n-hexane) =

K_4 (heptane) =

$$\sum_i \frac{Z_i}{K_i} =$$

T=

K_1 (n-butane) =

K_2 (n-pentane) =

K_3 (n-hexane) =

K_4 (heptane) =

$$\sum_i \frac{Z_i}{K_i} =$$

T=

K_1 (n-butane) =

K_2 (n-pentane) =

K_3 (n-hexane) =

K_4 (heptane) =

$$\sum_i \frac{Z_i}{K_i} =$$

T=

K_1 (n-butane) =

K_2 (n-pentane) =

K_3 (n-hexane) =

K_4 (heptane) =

$$\sum_i \frac{Z_i}{K_i} =$$

T=

x_1 (n-butane) =

x_2 (n-pentane) =

x_3 (n-hexane) =

x_4 (heptane) =

y_1 (n-butane) = 0.35

y_2 (n-pentane) = 0.3

y_3 (n-hexane) = 0.15

y_4 (heptane) = 0.2

Solución Problema : Temperatura de Rocío

Un Flash que opera en el punto de rocío a 400 kPa , el producto de cabeza (el vapor) tiene la siguiente composición molar: 35 % n-butano, 30 % n-pentano, 15 % n-hexano, 20 % heptano. Determinar la temperatura de operación del flash y la composición del líquido .

De la carta de DePriester :

$$T= 140^{\circ}\text{C}$$

$$K_1 \text{ (n-butano)} = 5,5$$

$$K_2 \text{ (n-pentano)} = 2,6$$

$$K_3 \text{ (n-hexano)} = 1,4$$

$$K_4 \text{ (heptano)} = 0,71$$

$$\sum_i \frac{Z_i}{K_i} = 0,568$$

$$T= 80^{\circ}\text{C}$$

$$K_1 \text{ (n-butano)} = 2,3$$

$$K_2 \text{ (n-pentano)} = 0,9$$

$$K_3 \text{ (n-hexano)} = 0,4$$

$$K_4 \text{ (heptano)} = 0,17$$

$$\sum_i \frac{Z_i}{K_i} = 2,03$$

$$T= 110^{\circ}\text{C}$$

$$K_1 \text{ (n-butano)} = 3,6$$

$$K_2 \text{ (n-pentano)} = 1,6$$

$$K_3 \text{ (n-hexano)} = 0,75$$

$$K_4 \text{ (heptano)} = 0,38$$

$$\sum_i \frac{Z_i}{K_i} = 1,01$$

$$T=$$

$$K_1 \text{ (n-butano)} =$$

$$K_2 \text{ (n-pentano)} =$$

$$K_3 \text{ (n-hexano)} =$$

$$K_4 \text{ (heptano)} =$$

$$\sum_i \frac{Z_i}{K_i} =$$

$$T= 110^{\circ}\text{C}$$

$$x_1 \text{ (n-butano)} = 0,1$$

$$x_2 \text{ (n-pentano)} = 0,19$$

$$x_3 \text{ (n-hexano)} = 0,2$$

$$x_4 \text{ (heptano)} = 0,53$$

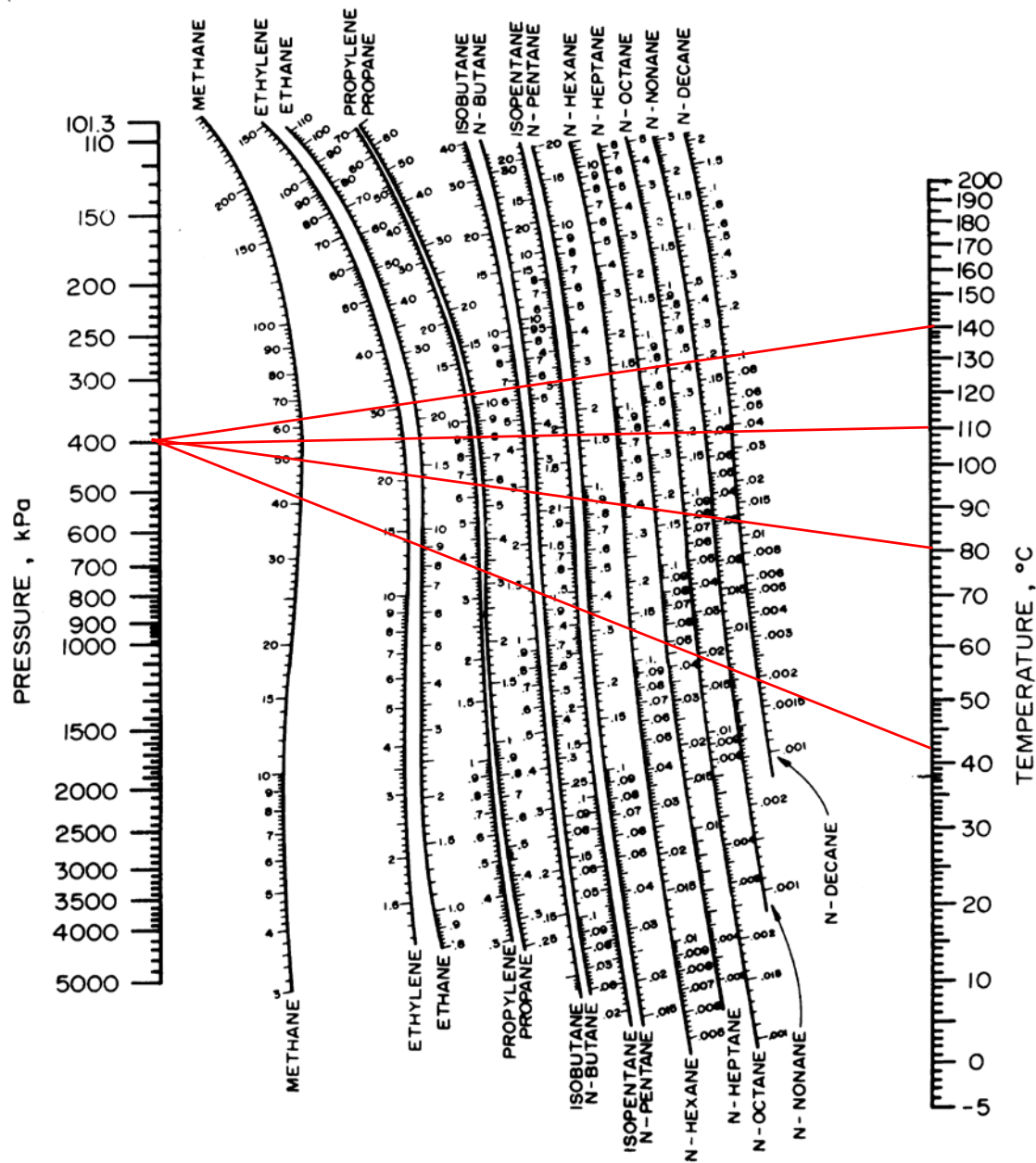
$$y_1 \text{ (n-butano)} = 0,35$$

$$y_2 \text{ (n-pentano)} = 0,3$$

$$y_3 \text{ (n-hexano)} = 0,15$$

$$y_4 \text{ (heptano)} = 0,2$$

K-Values Iterations for Dew Point Temperature



Problema: Presión Punto de Burbuja

Un Flash opera a la temperatura de burbuja, $T_b = 80\text{ }^\circ\text{C}$, produce por fondo un líquido de composición molar: 15 % n-butano, 20 % n-pentano, 25 % n-hexano, 40 % heptano. Determinar la presión del flash para operar en estas condiciones.

De la carta de Depriester :

P=

K_1 (n-butano) =

K_2 (n-pentano) =

K_3 (n-hexano) =

K_4 (heptano) =

$$\sum_i Z_i K_i =$$

P=

K_1 (n-butano) =

K_2 (n-pentano) =

K_3 (n-hexano) =

K_4 (heptano) =

$$\sum_i Z_i K_i =$$

P=

K_1 (n-butano) =

K_2 (n-pentano) =

K_3 (n-hexano) =

K_4 (heptano) =

$$\sum_i Z_i K_i =$$

P=

K_1 (n-butano) =

K_2 (n-pentano) =

K_3 (n-hexano) =

K_4 (heptano) =

$$\sum_i Z_i K_i =$$

V/F=

P=

x_1 (n-butano) = 0.15

x_2 (n-pentano) = 0.20

x_3 (n-hexano) = 0.25

x_4 (heptano) = 0.4

y_1 (n-butano) =

y_2 (n-pentano) =

y_3 (n-hexano) =

y_4 (heptano) =

Depriester Determination of K-Values

