

Universidad de Costa Rica

Facultad de Ingeniería
Escuela de Ingeniería Química
IQ-0335- Termodinámica II

Trabajo final

Profesora: Ing. Alejandra Araya Alfaro

Estudiante:

Erick Bolaños Jiménez
Mónica Fernández Mora
Daniela Ramírez Viales
Lucía Sanahuja Vindas

Carné:

B31040
B22516
B35690
B36401

Fecha de entrega: 05/07/2016

Grupo: 01

Se tiene un sistema ternario con una composición de 0,5 de benceno, 0,20 de tolueno y 0,3 de 1-butanol que entra al evaporador a una temperatura de 100°C , de donde se desea obtener una salida de fase vapor con una concentración de al menos de 80% de la concentración máxima posible del componente más liviano (benceno) de la mezcla, para ello se varía la presión de operación y la relación del reciclo (R), la cual se condensa antes de unirse a la alimentación fresca, de forma que entran al equipo como un líquido saturado.

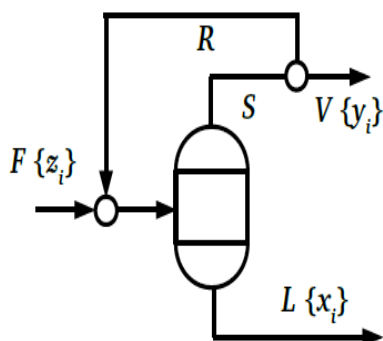


Figura 1. Evaporador.

RAOULT

Para dar resolución al inciso a del proyecto se considera el equipo de la Figura 1 sin tener en cuenta el reflujo, de manera que por medio de la Ley de Raoult y la presión de operación correspondiente al promedio de las presiones de burbuja y rocío se calcula la fracción de vaporización en el equipo.

Como se observa en el código, se proceden a establecer las condiciones de operación mencionadas anteriormente, se adjuntan las variables correspondientes para el cálculo de las presiones de saturación para cada uno de los componentes mediante Antoine y se crea una matriz en donde se guardan los valores de γ_i , P_{sat} , x_i , y_i , k y z de forma general.

Posteriormente se calcula la presión de burbuja de cada uno de los componentes y la presión de rocío para así obtener un promedio de estas de manera que se comienza el proceso iterativo, para ello se define un vector en donde se guardan las composiciones de las fases vapor, en donde la fracción de vapor máxima se consigue utilizando la presión de burbuja

de la mezcla y la mínima con la presión de rocío, además dicho proceso se finaliza cuando los valores de las fracciones molares de gas y líquido y fracción de la mezcla no difiera en el cuarto decimal de la iteración anterior. Dentro del sistema de iteración se calcula K_i con la ley de Raoult como:

$$K_i = P^{sat} * \frac{\gamma}{P} \quad (1)$$

Para encontrar el valor de V en un problema de vaporización instantánea, se puede utilizar el método de Newton para realizar un procedimiento iterativo utilizando:

$$F + \left(\frac{dF}{dV}\right)\Delta V = 0 \quad (2)$$

Con $\Delta V = V_{n+1} - V_n$ y donde F y su derivada se pueden calcular con las siguientes fórmulas:

$$F = \sum_i \frac{z_i(K_i - 1)}{1 + V(K_i - 1)} = 0 \quad (3)$$

$$\frac{dF}{dV} = - \sum_i \frac{z_i(K_i - 1)^2}{1 + V(K_i - 1)^2} = 0 \quad (4)$$

Seguidamente x_i y y_i se puede calcular con las siguientes fórmulas:

$$x_i = \frac{z_i}{1 + V(K_i - 1)} \quad (5)$$

$$y_i = K_i * x_i \quad (6)$$

Si hay una diferencia significativa entre el x_i actual y el anterior, entre el y_i actual y el anterior y entre el V actual y el anterior, es necesario volver a calcular un K_i y repetir todo el procedimiento anterior hasta que las diferencias sean lo suficientemente pequeñas, con esto, se soluciona en sistema.

RAOULT CON RECICLO

Para la parte b del proyecto se toma en cuenta la parte de reflujo del sistema el cual se observa en la Figura 1. Se calculan al igual que en la parte anterior, las presiones de burbuja y rocío para la mezcla obteniendo así el valor promedio necesario para empezar el proceso iterativo, sin embargo para realizar este se consideró el balance de masas en donde la corriente de entrada al evaporador está constituida por el flujo de alimentación más el 0.95 del vapor de salida de la corrida anterior. De la misma forma se calcula el valor de K_i , el valor de V mediante el método de Newton, para la posterior obtención de x_i y y_i , hasta que estos no varían en el cuarto decimal de la iteración anterior.

WILSON

Para calcular la parte del inciso c se toma en cuenta un reciclo de 0.5, para ello al inicio se calculan los coeficientes de actividad inicialmente suponiendo que los valores de $z=x$, o se a que toda la composición es líquida. También se calculan los valores de la presión de burbuja y rocío de la mezcla obteniendo un promedio para el inicio del proceso iterativo. Posteriormente se define el balance de masa para el proceso de reciclo, luego se vuelve a calcular las

presiones de burbuja y rocío en donde se consideran los coeficientes de actividad calculado las ecuaciones de Wilson. Estos se obtienen de la función definida en el código como WILSON, en donde se establecen los parámetros de Wilson y los volúmenes molares para la mezcla ternaria a 373.15 K. De la misma forma se calcula el valor de K_i , el valor de V mediante el método de Newton, para la posterior obtención de x_i y y_i , hasta que estos no varían en el cuarto decimal con respecto a la iteración anterior.

UNIFAC

Primero se realizaron tres funciones para rellenar matrices, la primera llamada getnum, se utiliza para recuperar valores de una matriz que tenga “dos títulos”, un título horizontal y un título vertical como lo es la matriz para a_{mk} . La segunda función llamada getvalc, se utiliza para llamar un valor de una matriz que contenga un título en las filas y la última función llamada getvalf, se utiliza para llamar un valor de una matriz que solo contenga columnas.

Seguidamente se realizó una función llamada UNIFAC la cual calcula los coeficientes de actividad. Para esto primero se realizó una matriz con los parámetros del subgrupo de EVL-UNIFAC y se realizó otra matriz con los parámetros de interacción de EVL_UNIFAC para a_{mk} .

Después se calculan los valores de r_i , q_i , J_i , L_i , $\ln(\gamma_i^C)$, $\ln(\gamma_i^R)$ y por último γ , todo esto utilizando las formulas proporcionadas por el método de UNIFAC. Dentro de las formulas de UNIFAC, si se requiere utilizar el valor

que se encuentra en la posición de una matriz se utilizan las funciones getnum, getvlac, getvalf cuando se requieran.

Inicialmente los coeficientes de actividad en la primera iteración, se calculan asumiendo que los valores de x_i son iguales a los valores de z_i , o sea se asume que todo esta en líquido.

Para calcular el valor de V , x_i y y_i , se utiliza el mismo código utilizado para calcular el punto a, pero difieren en que los coeficientes de actividad no se consideran igual a 1, sino que se calculan utilizando la función UNIFAC. De nuevo se iteran hasta que las diferencias entre los valores actuales de V , x_i y y_i difieran en menos de 0,0009 con los valores anteriores.

Bibliografía

- Gothard, F. A., Ciobanu, M. F. C., Breban, D. G., Bucur, C. I., & Sorescu, G. V. (1976). Predicting the Parameters in the Wilson Equations for Activity Coefficients in Binary Hydrocarbon Systems. *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, 15(2), 333–337. <http://doi.org/10.1021/i260058a020>
- Holmes, M. J., & Winkle, M. V. (1970). Prediction of ternary vapor-liquid equilibria from binary data. *Industrial & Engineering Chemistry*, 62(1), 21–31. <http://doi.org/10.1021/ie50721a005>
- Smith, J. M., Van Ness, H. C., Abbott, M. M., & Alatorre Miguel, E. (2007). *Introducción a la termodinámica en Ingeniería Química*. México: McGraw-Hill.

