

# PQI3402 / OP – III

## Operações flash

### Parte b

Marcelo Seckler

1

## Balanços de massa e energia, graus de liberdade

- Regra de fases de Gibbs p/ var. extensivas, C comp. e 2 fases.

- Equações: **E=2C+6**

- Balanços (E=C+1)

$$F=V+L$$

$$Fz_i = Vy_i + Lx_i \quad i=1 \text{ to } C-1$$

$$Fh_F + Q = Vh_V + Lh_L$$

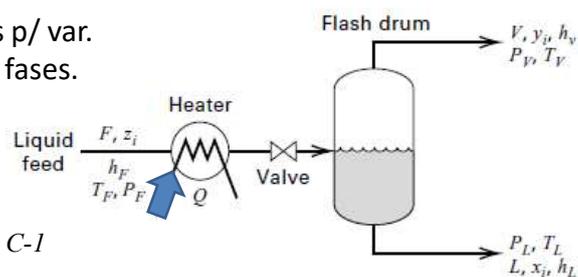
- Equilíbrio (C+2)

$$K_i = \frac{y_i}{x_i}, \quad i = 1 \text{ to } C$$

$$T_L = T_V \quad P_L = P_V$$

- Frações molares (3):

$$\sum_i x_i = 1 \quad \sum_i y_i = 1 \quad \sum_i z_i = 1$$



- Variáveis:  $3(C+3)+1$  **V=3C+10**

- Correntes de entrada e saída:

$$F, z_i, T_F, P_F \quad V, x_i, T_V, P_V \quad L, x_i, T_L, P_V$$

- Calor trocado: Q

- Graus de liberdade **F=C+4**

$$F = V - E$$

2

2

## Especificações comuns para operações flash

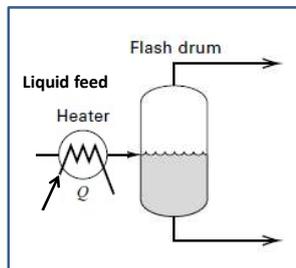
- Especifiquemos a alimentação:
  - $F, T_F, P_F$  (C-1) componentes
  - Logo, (C+2) variáveis especificadas
- Pela regra de fases, restam ainda  $F=C+4 - (C+2) = 2$ 
  - São dois graus de liberdade. Variáveis comumente especificadas são:

3

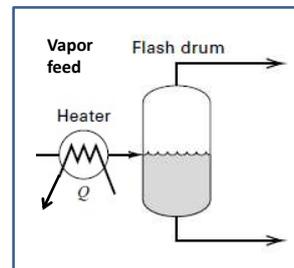
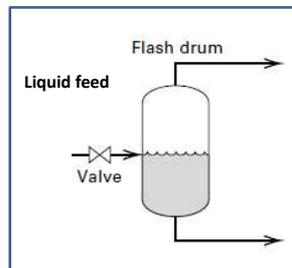
3

## Especificações comuns para operações flash

- Flash isotérmico
  - (T,P) são especificados
- Flash adiabático
  - $Q=0$ , P especificados
- Condensação parcial
  - Q, P especificados



- Alimentação líquida



- Alimentação é vapor
- Calor é removido

◦ Tipo de separação: criação de fase

4

4

## Especificações comuns para operações flash

- São dois graus de liberdade:

|                |                            |
|----------------|----------------------------|
| $T_V, P_V$     | Isothermal flash           |
| $V/F = 0, P_L$ | Bubble-point temperature   |
| $V/F = 1, P_V$ | Dew-point temperature      |
| $T_L, V/F = 0$ | Bubble-point pressure      |
| $T_V, V/F = 1$ | Dew-point pressure         |
| $Q = 0, P_V$   | Adiabatic flash            |
| $Q, P_V$       | Nonadiabatic flash         |
| $V/F, P_V$     | Percent vaporization flash |

5

5

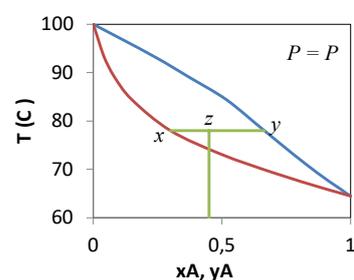
## Cálculos flash com diagrama de fases

- Úteis para sistemas binários
- Diagrama de fases T-x-y

- Usamos diagrama T-x-y e regra da alavanca

- Flash isotérmico (P,T especificados):

- $P \rightarrow$  usamos o diagrama em  $P=P$
- $T \rightarrow$  linha xy, x, y
- $z \rightarrow V/F$



- Flash com % vaporizada:

- $P \rightarrow$  usamos o diagrama em  $P$
- $V/F$  e  $z \rightarrow T, x, y$

- Regra da alavanca (BMG e BMComp):

$$V/F = \frac{z - x}{y - x}$$

6

6

## Quiz parte b exercício 1

- Para se descrever uma operação flash  
Escolha uma ou mais:
  - a) São requeridos os coeficientes de distribuição para cada componente
  - b) É requerido um balanço de massa para cada componente da alimentação
  - c) Uma vez especificada a alimentação do separador, é necessário ainda especificar mais duas variáveis
  - d) O balanço de energia em geral fornece a temperatura da alimentação

7

7

## Quiz parte b exercício 2

- Uma forma de operação comum de separações flash é o “flash adiabático”, no qual a corrente de alimentação simplesmente atravessa uma válvula  
Escolha uma ou mais:
  - a) A válvula tem a função de reduzir a pressão
  - b) As composições e vazões das correntes de saída são calculadas
  - c) A válvula tem a função de controlar a vazão
  - d) A carga térmica requerida é calculada

8

8

## Quiz parte b exercício 3

- Diagramas de fases são úteis para se descrever operações flash quando:

Escolha uma ou mais:

- a) O sistema é bicomponente
- b) O sistema tem comportamento que se desvia do ideal
- c) Não há dados experimentais nem modelos termodinâmicos sobre o sistema

9

9

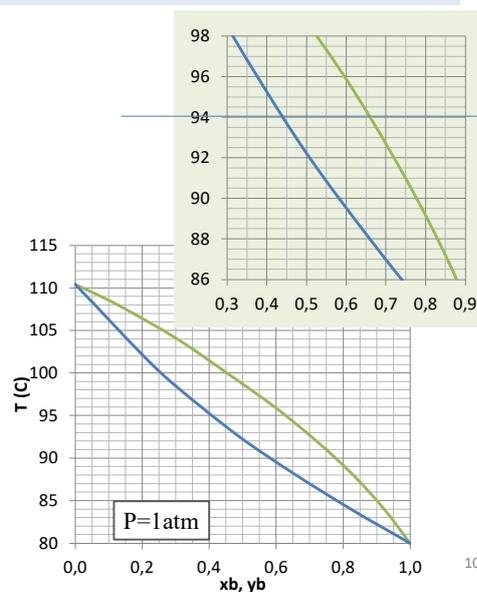
## Exercício 4.3a- flash com diagrama de fases

Seja uma corrente de 10 mol/s de uma mistura 60% molar de benzeno em tolueno a 101.3 kPa (diagrama Txy conhecido).

Deseja-se evaporar 71% da corrente líquida num flash a 101.3 kPa.

Especificar a temperatura de operação do flash e as composições e vazões na saída do separador.

Determinar a volatilidade relativa nas condições especificadas.



10

## Cálculos flash com modelos termodinâmicos

- Úteis para sistemas com qualquer número de componentes C
  - Para  $C > 3$ , em geral esta é a única opção.
- Procedimento de cálculo depende das especificações
- Para flash isotérmico (T e P especificados) usa-se
  - Procedimento Rachford-Rice.
  - Se  $K=K(T,P)$  converge facilmente.
  - Se K depende de x, é necessário um loop externo de iteração

11

11

## Flash isotérmico (T,P conhecidos): Procedimento Rachford-Rice

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <p><b>Equation</b></p> <p>(1) <math>P_V = P_L</math></p> <p>(2) <math>T_V = T_L</math></p> <p>(3) <math>y_i = K_i x_i</math></p> <p>(4) <math>Fz_i = Vy_i + Lx_i</math></p> <p>(5) <math>F = V + L</math></p> <p>(6) <math>h_F F + Q = h_V V + h_L L</math></p> <p>(7) <math>\sum_i y_i - \sum_i x_i = 0</math></p> <p><math>K_i = K_i(T_V, P_V, y, x)</math></p> <p><math>h_V = h_V(T_V, P_V, y)</math></p> <p><math>h_F = h_F(T_F, P_F, z)</math></p> <p><math>h_L = h_L(T_L, P_L, x)</math></p> | <p><b>Specified variables:</b> <math>F, T_F, P_F, z_1, z_2, \dots, z_C, T_V, P_V</math></p> <p><b>Steps</b></p> <p>(1) <math>T_L = T_V</math></p> <p>(2) <math>P_L = P_V</math></p> <p>(3) Solve</p> <p style="text-align: right;"><math>\rightarrow K_i</math></p> <p style="text-align: center;"> <math>f\{\Psi\} = \sum_{i=1}^C \frac{z_i(1 - K_i)}{1 + \Psi(K_i - 1)} = 0</math> </p> <p style="text-align: center;">for <math>\Psi = V/F</math>, where <math>K_i = K_i(T_V, P_V)</math>.</p> <p>(4) <math>V = F\Psi</math></p> <p>(5) <math>x_i = \frac{z_i}{1 + \Psi(K_i - 1)}</math></p> <p>(6) <math>y_i = \frac{z_i K_i}{1 + \Psi(K_i - 1)} = x_i K_i</math></p> <p>(7) <math>L = F - V</math></p> <p>(8) <math>Q = h_V V + h_L L - h_F F</math></p> |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

12

$$F = V + L$$

$$1 = \psi + \frac{L}{F}$$

$$\bar{F} z_i = V y_i + L x_i$$

$$z_i = \psi y_i + \frac{L}{F} x_i$$

$$\bar{z}_i = \psi (K_i x_i) + (1 - \psi) x_i$$

$$y_i = K_i x_i$$

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

$$y_i = \frac{K_i z_i}{1 + \psi (K_i - 1)}$$

$$\sum y_i = 1 \quad \sum x_i = 1$$

$$\sum y_i - \sum x_i = 0$$

$$\sum_{i=1}^m \frac{z_i (K_i - 1)}{1 + \psi (K_i - 1)} = 0$$

13

## Flash isotérmico (T,P conhecidos): Procedimento Rachford-Rice

- Resolver a equação  $f(\Psi)=0$ :
  - Verificar se na T,P escolhidas coexistem duas fases (somente neste caso haverá uma raiz válida para  $\Psi$ , com  $0 < \Psi < 1$ ):
    - Se  $K_i > 1$  para todos os componentes  $\rightarrow$  vapor superaquecido
    - Se  $K_i < 1$  para todos os componentes  $\rightarrow$  líquido subresfriado
    - Se alguns  $K_i > 1$  e outros  $K_i < 1$ , verificação adicional:
      - Se  $f(\Psi=0) > 0 \rightarrow$  líquido subresfriado (mistura abaixo do ponto de bolha)
      - Se  $f(\Psi=1) < 0 \rightarrow$  vapor superaquecido (mistura acima do pto de orvalho)
  - Se mistura entre o ponto de bolha e o de orvalho, achar a raiz de  $f(\Psi)=0$ :
    - Usar solver do Excel ou outro solver.
    - pelo método de Newton (ver S&H 2011 p.148). Se  $K_i$  dependente da composição, pode ser necessário outro método (alguns simuladores usam método de Boston and Britt)

14

14

## Método de Newton

- Desejamos encontrar a raiz da seguinte equação:

$$f\{\Psi\} = \sum_{i=1}^C \frac{z_i(1 - K_i)}{1 + \Psi(K_i - 1)} = 0$$

$$K_i = K_i(T_V, P_V)$$

- Partindo da estimativa k, a estimativa k+1 é dada por:

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

- Onde f' é a derivada da função, que no caso é dada por:

$$f'\{\Psi^{(k)}\} = \sum_{i=1}^C \frac{z_i(1 - K_i)^2}{[1 + \Psi^{(k)}(K_i - 1)]^2}$$

Fonte: Seader & Henley 2011 , p.148

15

15

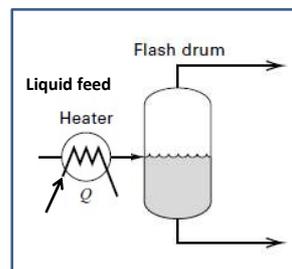
## Outras especificações para Flash

- Flash com P e V/F especificados

- $\Psi = V/F$  é conhecido, mas  $K_i(T)$  não.
- Como  $K_i(T)$  são funções conhecidas de T, basta iterar T para achar a raiz da equação.

$$f\{\Psi\} = \sum_{i=1}^C \frac{z_i(1 - K_i)}{1 + \Psi(K_i - 1)} = 0$$

$$K_i = K_i(T_V, P_V)$$

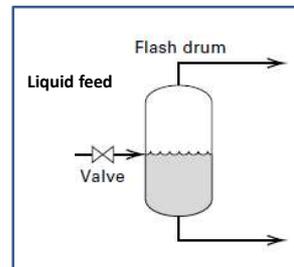


16

16

## Outras especificações para Flash

- Flash adiabático ( $Q=0$ ,  $P$  conhecido)
  - Alimentação tem sua pressão diminuída ao passar por uma válvula.
  - Logo a pressão no tambor é especificada, mas a temperatura é desconhecida.



- Solução
  - Estima-se  $T$  e calcula-se flash isotérmico
  - Aplica-se BE para verificar se  $Q=0$ :

$$f\{T_V\} = \frac{\Psi h_V + (1 - \Psi)h_L - h_F}{1,000} = 0$$

17

17

## Resumo

- Vimos que uma operação flash é descrita por
  - Balanços de massa e energia, relações de equilíbrio para cada componente no sistema multifásico
  - Conhecida a alimentação, restam 2 variáveis a especificar
    - $T, P \rightarrow$  flash isotérmico
    - $V/F, P \rightarrow$  flash com % vaporizada
    - $Q=0, P \rightarrow$  flash adiabático
- Resolução das equações
  - Depende das variáveis a especificar; Rachford-Rice é útil para os três casos acima com  $K=K(T,P)$
  - Para sistemas binários basta leitura dos diagramas de fase

18

18

## Exercício 4.5: flash isotérmico com modelo termodinâmico

- A seguinte corrente é alimentada a um tambor flash

|           |    |        |         |
|-----------|----|--------|---------|
|           | F  | 100    | kmol/h  |
| Propano   | z3 | 0.1    | mol/mol |
| N-butano  | z4 | 0.2    | mol/mol |
| N-pentano | z5 | 0.3    | mol/mol |
| N-hexano  | z6 | 0.4    | mol/mol |
|           | P  | 689500 | Pa      |
|           | T  | 300    | K       |

- No tambor, a corrente é aquecida isobaricamente até 366.5K. Nas condições do tambor, o equilíbrio é dado por

|    |      |
|----|------|
| K3 | 4.2  |
| K4 | 1.75 |
| K5 | 0.74 |
| K6 | 0.34 |

- (a) Indique se o problema está especificado corretamente.
- (b) o estado no tambor é realmente L-V?
- (c) qual a fração da alimentação vaporizada no tambor?
- (d) qual a composição do vapor e do líquido deixando o tambor?
- (e) indique como calcular o calor a ser fornecido ao sistema

