

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)

$$F=V+L$$

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

$$Fh_F + Q = Vh_V + Lh_L$$

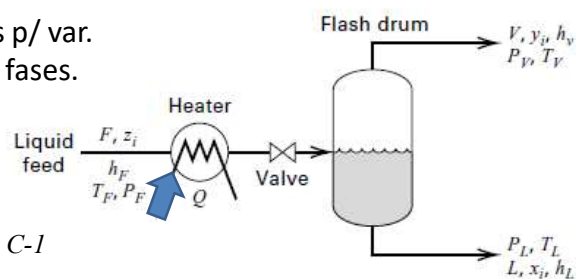
- Equilíbrio (C+2)

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

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

- 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

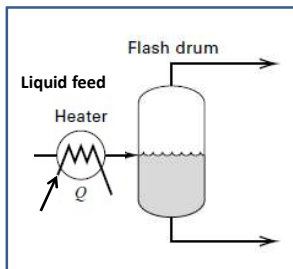
- Especifiquemos a alimentação:
 - F, T_F, P_F (C-1) componentes
 - Logo, (C+2) variáveis especificadas
- Pela regra de fases, restam ainda $F=C+4 - (C+2) = 2$
 - São dois graus de liberdade. Variáveis comumente especificadas são:

3

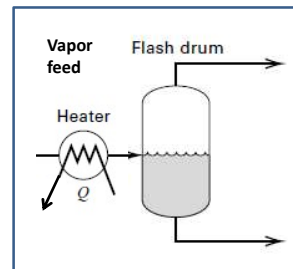
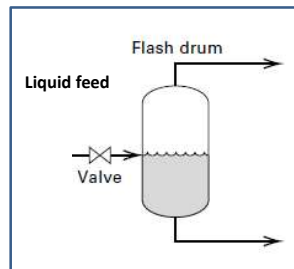
3

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

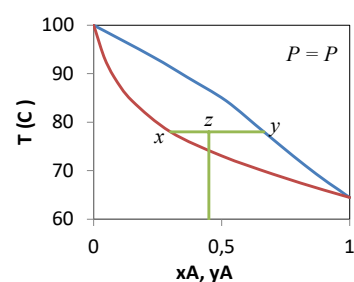
Cálculos flash com diagrama de fases

- 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

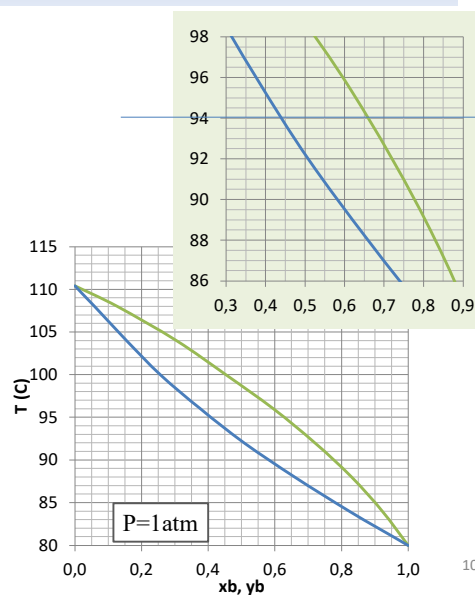
Exercício 4.3a- flash com diagrama de fases

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

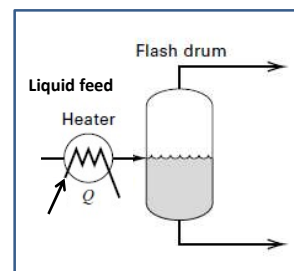
Outras especificações para Flash

- 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.

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

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

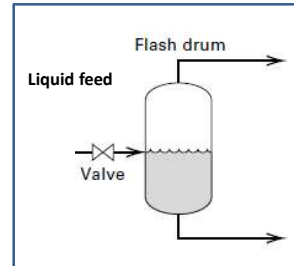


16

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

