Seminario 4

Caudal total: $F = 200 \text{ kmol/h}$

Fracción molar del agua: $z_1 = 0,50$

" " del glicol → $z_2 = 0,50$

$P_{bar} = 1 \text{ bar} = 1000 \text{ mbar}$

Por tanto los caudales molares de alimentación son

$F_1 = 200 \cdot 0,5 = 100 \text{ kmol/h}$

$F_2 = \quad " \quad = 100 \text{ kmol/h}$

Presión de vapor de los componentes puros según el enunciado

Para el agua → $P_1^V = 0,00274T^3 - 2,1741T^2 + 747177T - 75894$

Para el glicol → $P_2^V = 0,000867T^3 - 0,5167T^2 + 2971,4T - 33582$

Como la mezcla no es ideal utilizamos la ley de Raoult modificada

$\Phi_i P_i = x_i \gamma_i P_i^V$

Agua → $\gamma_1 = -0,121x^2 + 0,07x_1 + 1,28$

Glicol → $\gamma_2 = 31,8x_1^5 - 64,4x_1^4 + 46,2x_1^3 - 13,3x_1^2 + 1,3x_1 + 1$

$$x_2 = 1 - x_1$$

$P_{total} = x_1 y_1 P_1^x + x_2 y_2 P_2^x$

1) Ecuación de T de burbuja

La temp de burbuja es aquella a la que comienza a vaporizarse una nueva cantidad de composición conocida

$$P = x_1 y_1 P_1^x + (1-x_1) y_2 P_2^x$$

$x_1 = 0,5$

$x_2 = 1-0,5$

Calculamos los coeficientes de actividad →

Para el H_2O: $\gamma_1 = -0,2(0,5)^2 - 0,07(0,5) + 1,28 = 1,1925$

Para el glicol → $\gamma_2 = 31,8 \cdot (0,5)^3 - 64,4(0,5)^4 + 46,2 \cdot (0,5)^3 - 13,3(0,5)^2 + 1,3(0,5) + 1$

$= ~~1,0685~~ \; 1,06875$

Sustituimos en la ecuación de la burbuja →

$1000 = 0,5(1,1925) P_1^x + 0,5(1,06875) P_2^x$

Sustituimos las expresiones de la presión de vapor

$1000 = 0,596250 (0,00274T^3 - 2,47412 + 747,777T - 7594) + 0,54375 (0,0086T^3 - 0,876T^2 + 297,4T - 33582)$

$T = 383,50\ K$

¿Cómo calculamos la comp de vapor?

Una vez conocemos la temperatura, calculamos la presión parcial del agua

$$P_1 = x_1 \gamma_1 P_1^x$$

$$P_1^x = 0,000274T^3 - 2,471T^2 + 747,7777T - 75894 = 1550,2384 \text{ bar}$$

$x_1 = 0,5$

$\gamma_1 = 1,1925$

$P_1^x = 1550,2384 \text{ mbar}$

$$P_2 = x_2 \gamma_2 P_2^x$$

$x_2 = 0,5$

$\gamma_2 = 1,06875$

$P_2^x = 0,00086T^3 - 0,876T^2 + 297,47T - 33582 = 141,6053$ mbar

H_2O

$P_1 = x_1 \cdot \gamma_1 \cdot P_1^x = 0,5 \cdot 1,1925 \cdot 1550,235 = 924,33$ mbar

$P_2 = 0,5 \cdot 1,06875 \cdot 141,6053 = 75,67$ mbar

Hacer la composición del vapor de cloro mediante

$$\gamma_1 = \frac{P_1}{P} = \frac{924,33}{1000} = 0,92433$$

$$\gamma_2 = 1 - 0,92433 = 0,075567$$

$(x_1, T, y_1) = (0,5; 383,50; 0,92433)$



Ejemplo: $x_1 = 0,3$

$x_2 = 1 - 0,3 = 0,7$

Coeficiente de actividad agua → $y_1 = -0,21(0,3)^2 - 0,07(0,3) + 1,28 = 1,2401$

Para el glicol: $y_2 = 31,8(0,3)^5 + 64,4(0,3)^4 + 46,2(0,3)^3 - 13,3(0,3)^2 + 1,3(0,3) + 1 = 0,9960$

Planteando la ecuación de burbujo:

$$1000 = 0,3(1,2401) P_1^x + 0,7(0,9960) P_2^x$$

$$4000 = 0,37203(0,00274T^3 - 2,471T^2 + 747,77T - 75894) + 0,697223(0,00086T^3 - 0,876T^2 + 297,4T - 33582)$$

$$T = 394,5906 K$$

$P_1^x = 2291,4313$ mbar

$P_2^x = 211,5803$ mbar

Presión parcial del agua

$P_1 = 0{,}3 \cdot 1{,}2401 \cdot 2291{,}4313 = 852{,}4812$ mbar

La composición del vapor es →

$y_1 = \frac{852{,}4812}{1000} = 0{,}8524821$

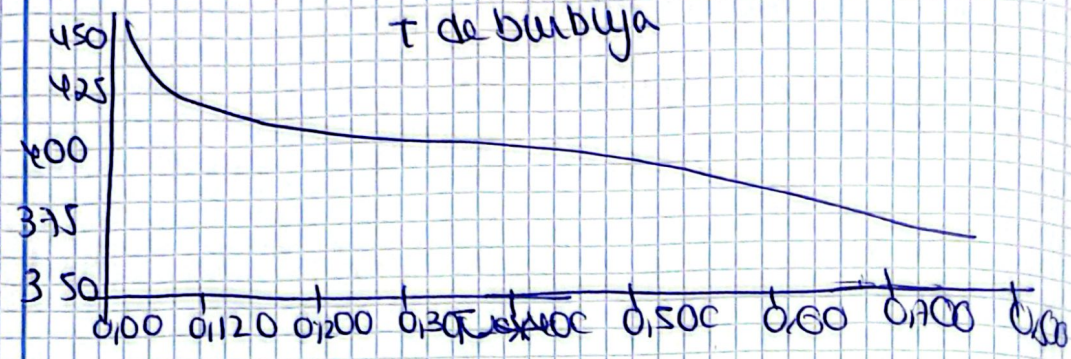
$(x_1, T, y_1) = (0{,}3;\ 394{,}5906;\ 0{,}8524821)$

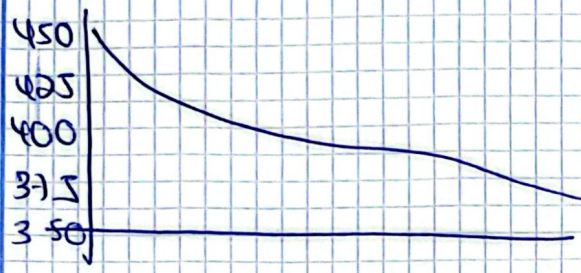
x_1	T (K)	y_1
0,0	442,306	0,00
0,1	417,1200	0,56 m
0,2	403,631	0,7635
0,3	394,561	0,8525
0,4	388,179	0,8971
0,5	383,520	0,9243
0,6	380,075	0,9447
0,7	377,474	0,9611
0,8	375,464	0,9734
0,9	373,936	0,9834
1	372,992	1,000

Scanned with CamScanner

T - X

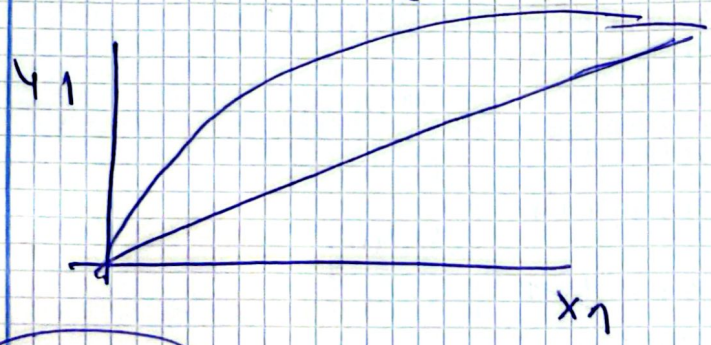
1) curva + temperatura





T - y

Construccion de diagrama y - x



Apartado B

z_1 - Fracción molar de agua en alimentación

x_1 - " " " en líquido

y_1 - Fracción molar de agua en vapor

en la alimentación $z_1 = 0,5$

$x_1 = y_1 = 0,5$

Cuando existen ~~componentes~~ equilibrio líquido vapor, generalmente $x_1 = y_1$

Con ecuación de equilibrio

$$y_1 \cdot P = x_1 y_1 \cdot P_1 x$$

$K_1 = \frac{y_1}{x_1}$ → constante de equilibrio

Si combinamos ambas expresiones

$$K_1 = \frac{y_1 \cdot P_1 x}{P}$$

Volatilidad relativa: $\alpha_{12} = \frac{K_1}{K_2}$

$\alpha_{12} = \frac{K_1}{K_2}$ ← constante de equilibrio de agua

constante de equilibrio del gas

volatilidad del agua respecto al estado líquido

$$= \frac{y_1 \cdot P_1 x}{y_2 \cdot P_2 x}$$

4) estado líquido subenfriado

Mezcla que se encuentra completamente en estado líquido y cuya Temp < Tburbuja

$H_{21} = 0,5$ → Fracción molar de agua en alimentación

$T < 383,5197 K$

c) Existe fase líquida)

Como toda la alimentación está en estado líquido, su composición coincide con la global.

$x_1 = z_1 = 0,5$

Para el glicol → $x_2 = z_2 = 0,5$

d) Existe fase de vapor?

No existe fase de vapor

La composición de vapor → $y_1 = 0,02433$

$y_2 = 0,07567$

$K_1 = \frac{x_1}{y_1} = 1,84866$ $\quad \alpha_{12} = 12,2152$

$K_2 = \frac{x_2}{y_2} = 0,13134$

Segundo grado – líquido saturado → el que está a punto de ~~condensarse~~ vaporizarse

Es decir contiene únicamente líquido pero cualquier pequeño TT a P cte → provoca la aparición de vapor

La temperatura de rocío es la temperatura de burbuja

1) Conocemos la composición de líquido

La composición global es $z_1 = 0,5$

Como todavía estamos en cambio de la aparición de fase de vapor, el líquido conserva toda la composición de la alimentación

$x_1 = 0,5$
$x_2 = 0,5$ y

Calculamos los coeficientes de actividad

Para el agua: $y_1 = -0,21(0,5)^3 - 0,7(0,5) + 1,28$
$= 1,1925$

Para el glicol: $y_2 = 31,8(0,5)^3 - 64,4(0,5)^4$
$+ 46,12(0,5)^3 - 13,3(0,5)^2 + 1,3(0,5) + 1$
$= 1,06875$

$T = 383,57\ K$
$y_1 = 0,9043295$
$y_2 = 0,075$

$K_1 = \frac{y_1}{x_1} = \frac{0,9043}{0,5} = 1,848$

$K_2 = \frac{y_2}{x_2} = 0,075 / 0,5$
$= 0,151341$

$\alpha_{12} = 12,2512$

Temperatura de rocío

todavía esta todo el sistema en fase de vapor
la composición de vapor coincide con la global

$y_1 = z_1 = 0,5$ $\quad P_{Total} = 1\ bar = 1000\ mbar$
$y_2 = z_2 = 0,5$

$y_1 \cdot P_1 = x_1 \cdot y_1 \cdot P_1^x$

Para el agua (componente 1)

$0,5 \cdot 1000 = x_1 y_1 P_1^x$
$500 = x_1 y_1 P_1^x$

Para el glicol (C2)

$0,5 \cdot 1000 = x_2 \gamma_2 P_2 x \qquad x_2 = 1 - x_1$

$500 = (1-x_1)\gamma_2 P_2 x$

Se reacciona con los coeficientes de actividad

$\gamma_1 = -0,021 x_1^2 - 0,07 x_1 + 1,28$

$\gamma_2 = 31,8 x_1^5 - 64,4 x_1^4 + 46,2 x_1^3 - 13,3 x_1^2 + 1,3 x_1 + 1$

$500 = x_1 (-0,021 x_1^2 - 0,07 x_1 + 1,28) \cdot P_1 x$

$500 = (1 - x_1)(31,8 x_1^5 - 64,4 x_1^4 + 46,2 x_1^3 - 13,3 x_1^2 + 1,3 x_1 + 1) P_2 x$

$P_1 x = 0,000247 T^3 - 0,1741 T^2 + 347,777 T - 75894$

$P_2 x = 0,00086 T^3 - 0,816 T^2 + 297,47 - 33582$

Se resuelven con las expresiones

$500 = x_1 \gamma_1 (x_1) \cdot P_1 x (T)$

$500 = (x_1 - x_1) \gamma_2 \cdot P_2 x (T)$

$x_1 = 0,081798$

$x_2 = 1 - 0,081798$

$T R = 420,15 K$

③ Estado mezcla líquido vapor

Para nuestra composición global → $z_1 = 0,5$ →

la composición debe encontrarse entre la temperatura de burbuja y de Rocío

$303,5193 < T < 420,4994K$

Existe líquido y vapor

Como no especifica una Temp → $T = 395K$

① Calculamos P_1^x → Enunciado

$= 2332,32 mbar$

$P_2^x = 214,7925 mbar$

Calculamos x_1 y x_2 →

$P = x_1 y_1 P_1^x + x_2 y_2 P_2^x$

$x_2 = 1 - x_1$

$1000 = x_1 y_1 P_1^x + (1 - x_1) y_2 P_2^x$

$1000 = 2332,32 x_1 [-0,21 x_1^2 + 0,07 x_1 + 1,28] + 214,7925 (1 - x_1) [31,8 x_1^5 - 64,4 x_1^4 + 46,2 x_1^3 - 13,3 x_1^2 + 1,3 x_1 + 1]$

$0 = -6830,40156 x_1^6 + 20663,0385 x_1^5 - 23256,0505 x_1^4 + 12292,466 x_1^3$

$-3298{,}5329x_1^2 + 3037{,}0074x_1 - 785{,}2075$

$x_1 = 0{,}2946$

$x_2 = 0{,}70$

Coeficiente de actividad

Agua $\rightarrow \gamma_1 = -0{,}21(0{,}29401)^2 - 0{,}07(0{,}294) + 1{,}28$

$= 1{,}241149$

Glicol $\rightarrow \gamma_2 = 31{,}8(0{,}2946015)^5 + 64{,}4$

$(0{,}29461549)^4 + 46{,}2(0{,}29461549)^3 - 13{,}3$

$(0{,}29461549)^2 + 1{,}3(0{,}29461549) + 1 = 0{,}995413$

$$y_1 = \frac{x_1 \gamma_1 P^{\wedge} x}{P}$$

$$= \frac{0{,}2946 \cdot 1{,}241149 \cdot 2322{,}32}{1000}$$

$= 0{,}849$

$y_2 = 1 - 0{,}849 = 0{,}150816$

$K_1 \rightarrow y_1/x_1 = 0{,}849184 / 0{,}29461549 =$

$= 2{,}88235$

$K_2 = y_2/x_2 = 0{,}150816 / 0{,}70538451 = 0{,}213857$

$\alpha 12 = \frac{2,88235}{0,213807} = 13,4811$

Cuando estado - vapor saturado

El vapor que esta a punto de condensarse

Es decir cuando vapor y se enfriamos aparece la 1 gota de liquido

$y1 = x1 = 0,5$
$y2 = x2 = 0,5$ } Aquí desconocemos

T ROCIO = 420,444 K

$P_1 x = 4802,2185$ mbar
$P_2 x = 523,6657$ mbar

$y1 = \frac{x1 \cdot y1 \cdot P_1 x}{1000}$ | $y2 = \frac{x2 \cdot y2 \cdot P_2 x}{1000}$

Sacamos x1 | Sacamos x2

0,0817983 | X2 = 0,918

$K_1 = \frac{y1}{x1} = \frac{0,5}{0,0817983} = 6,112596$

$K_2 = \frac{y2}{x2} = \frac{0,5}{0,9182} = 0,5445$

$\alpha 12 = \frac{K_1}{K_2} = \frac{6,112596}{0,544543} = 11,22519$

Cuarto estado: Vapor sobrecalentado

Es un vapor que se encuentra a una T superior a la del rocío

En este caso para la composición global

$z_1 = 0,5$

$T > T_{rocío}$

Como toda la mezcla está en fase de vapor la composición de vapor coincide con la global

$y_1 = z_1 = 0,5$

$y_2 = z_2 = 0,5$

Si podemos calcular la composición del líquido inicial en el punto de condensación

En el estado de vapor saturado:

$x_1 = 0,05179356$

$x_2 = 0,9482$

En el vapor sobrecalentado no existe una fase líquida en equilibrio, por lo que no podemos calcular directamente una constante

$K_1 = y_1 / x_1$, de las 2 fases presentes

Justo antes de entrar en la región bifásica

$K_1 = 6,112596$
$K_2 = 0,514543$
$\} \alpha_{12} = 11,88514$

Líquido saturado

Toda la mezcla permanece líquida

$T < 383,52 K$

Líquido saturado: $T = 383,52 K$

Punto de burbuja

Mezcla líquido vapor

Coexisten líquido y vapor

$358,72 < T < 420,50 K$

Vapor saturado

Punto de Rocío

$T = 420,50 K$

Aparece la primera gota de líquido al enfriar