

Proračuni fazne ravnoteže

Predavanja i upute za
II. numerički zadatak

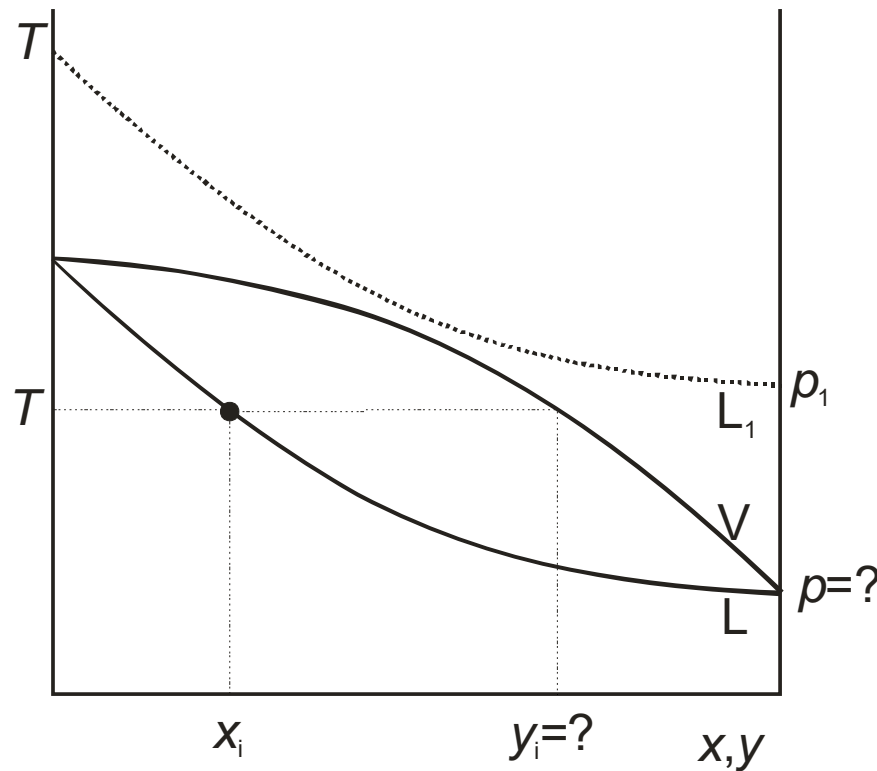
Proračuni fazne ravnoteže

- proračuni vrelišta
- proračuni kapljišta
- proračuni jednokratnog isparavanja

Proračun vrelišta uz stalnu temperaturu

bubble-point problem

npr. pri isparavanju u izoliranom cjevovodu uslijed pada tlaka



Formulacija

$$T, x_i \rightarrow p, y_i$$

Broj nepoznanica: $nk+1$

Proračun vrelišta uz stalnu temperaturu

Jednadžbe

$$f(p) = -1 + \sum_{i=1}^{nk} y_i = -1 + \sum_{i=1}^{nk} K_i x_i = 0$$

Bilanca tvari za parnu fazu

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} = f(p, T, x_i, y_i)$$

Ravnotežne jednadžbe

Proračun vrelišta uz stalnu temperaturu

Kombiniranje bilančnih i ravnotežnih jednažbi

$$\sum_{i=1}^{nk} p y_i = \sum_{i=1}^{nk} x_i \gamma_i^L p_i^\bullet \exp \left[\frac{v_i^L (p - p_i^\bullet)}{RT} \right]$$

$$T, x_i \rightarrow p, y_i$$

$$p \sum_{i=1}^{nk} y_i = \sum_{i=1}^{nk} x_i \gamma_i^L p_i^\bullet \exp \left[\frac{v_i^L (p - p_i^\bullet)}{RT} \right]$$

$$p = \sum_{i=1}^{nk} x_i \gamma_i^L p_i^\bullet \exp \left[\frac{v_i^L (p - p_i^\bullet)}{RT} \right]$$

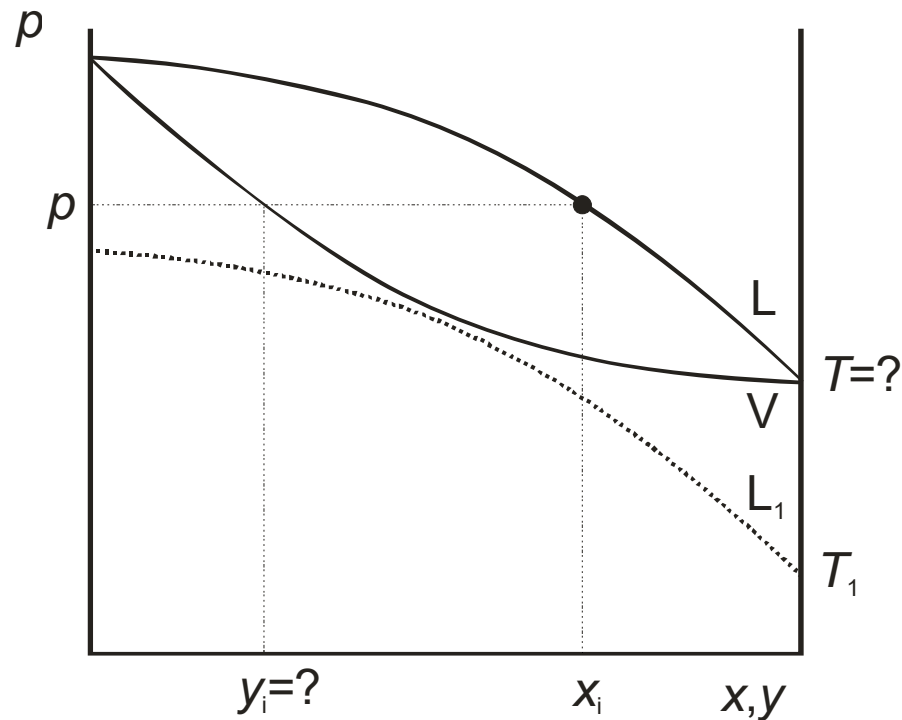
Metoda direktne iteracije

$$y_i = x_i \gamma_i^L p_i^\bullet \exp \left[\frac{v_i^L (p - p_i^\bullet)}{RT} \right]$$

Proračun vrelišta uz stalan tlak

bubble-point problem

npr. pri procjeni isparavanja uskladištene kapljevine



Formulacija

$$p, x_i \rightarrow T, y_i$$

Broj nepoznanica: $nk+1$

Proračun vrelišča uz stalan tlak

Jednadžbe

$$f(p) = -1 + \sum_{i=1}^{nk} y_i = -1 + \sum_{i=1}^{nk} K_i x_i = 0$$

Bilanca tvari za parnu fazu

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} = f(p, T, x_i, y_i)$$

Ravnotežne jednadžbe

Proračun vrelišča uz stalan tlak

Kombiniranje bilančnih i ravnotežnih jednažbi $p, x_i \rightarrow T, y_i$

$$p = \sum_{i=1}^{nk} x_i \gamma_i^L p_i^\bullet \exp \left[\frac{v_i^L (p - p_i^\bullet)}{RT} \right] \quad \text{Metoda direktne iteracije}$$

$$p < p \Rightarrow T = T + \Delta T$$

Metoda pokušaja i pogreške

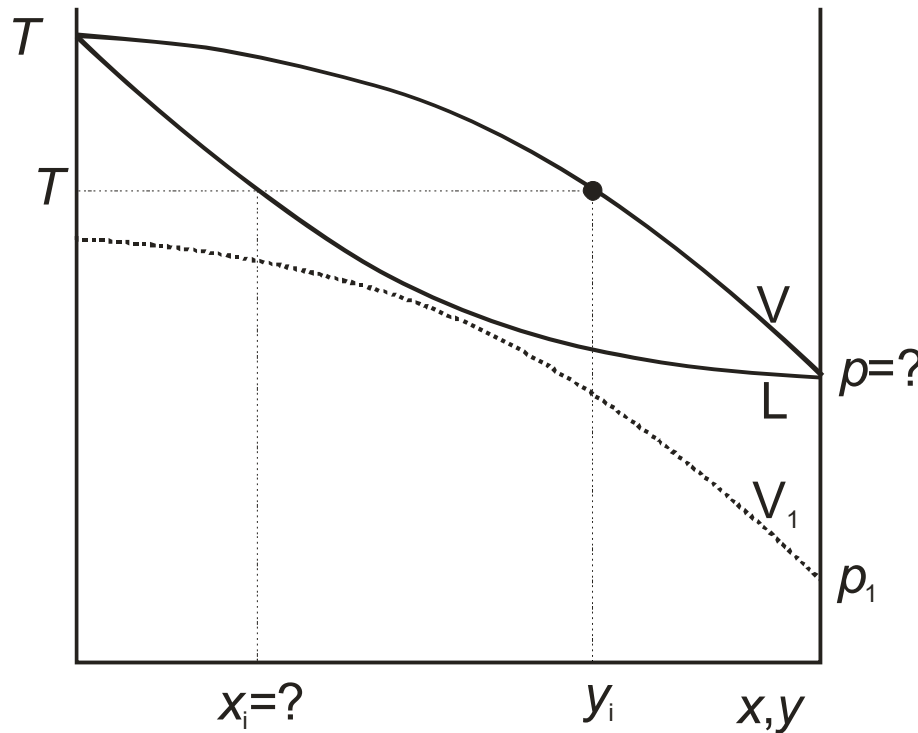
$$p > p \Rightarrow T = T - \Delta T$$

$$y_i = x_i \gamma_i^L p_i^\bullet \exp \left[\frac{v_i^L (p - p_i^\bullet)}{RT} \right]$$

Proračun kapljišta uz stalnu temperaturu

dew-point problem

npr. pri ukapljivanju plinovite smjese povećanjem tlaka pri stalnoj temperaturi



Formulacija

$$T, y_i \rightarrow p, x_i$$

Broj nepoznanica: $nk+1$

Proračun kapljišta uz stalnu temperaturu

Jednadžbe

$$f(p) = -1 + \sum_{i=1}^{nk} x_i = -1 + \sum_{i=1}^{nk} \frac{y_i}{K_i} = 0$$

Bilanca tvari za kapljevitú fazu

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} = f(p, T, x_i, y_i)$$

Ravnotežne jednadžbe

Proračun kapljišta uz stalnu temperaturu

Kombiniranje bilančnih i ravnotežnih jednažbi

$$T, y_i \rightarrow p, x_i$$

$$p = \sum_{i=1}^{nk} x_i \gamma_i^L p_i^\bullet \exp \left[\frac{v_i^L (p - p_i^\bullet)}{RT} \right]$$

Metoda direktne iteracije

$$y_i = x_i \gamma_i^L p_i^\bullet \exp \left[\frac{v_i^L (p - p_i^\bullet)}{RT} \right]$$

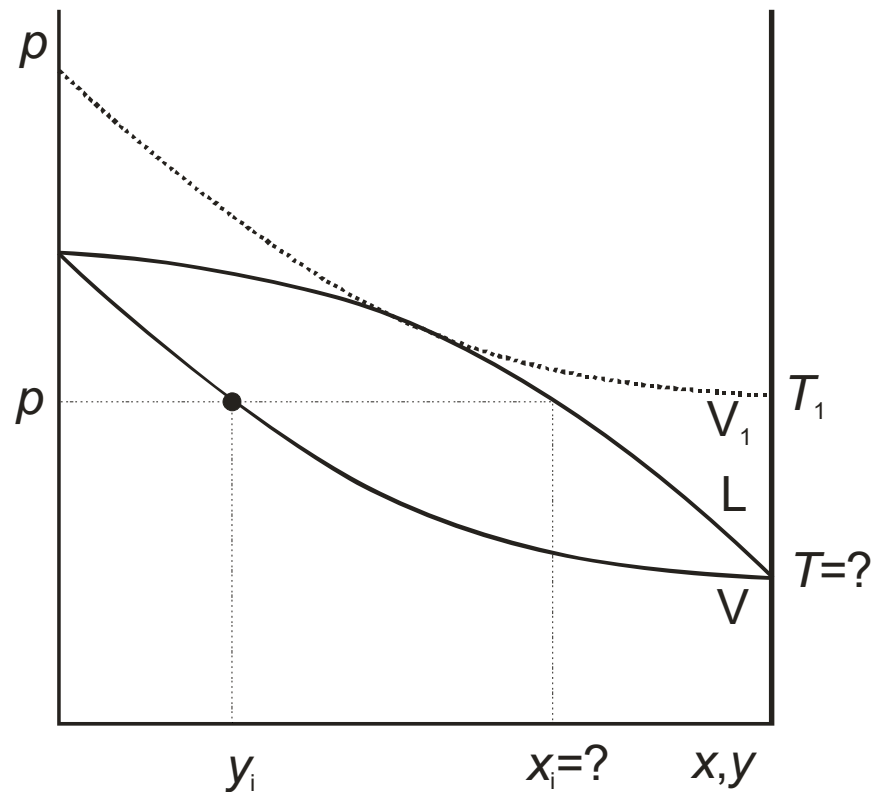
$$y_i = y_i \quad x_i = \frac{y_i}{\frac{\gamma_i^L p_i^\bullet}{p} \exp \left[\frac{v_i^L (p - p_i^\bullet)}{RT} \right]}$$

Metoda pokušaja i pogreške

Proračun kapljišta uz stalan tlak

dew-point problem

npr. skladištenju ili strujanju plinovite smjese u uvjetima niskih, zimskih temperatura



Formulacija

$$p, y_i \rightarrow T, x_i$$

Broj nepoznanica: $nk+1$

Proračun kapljišta uz stalan tlak

Jednadžbe

$$f(T) = -1 + \sum_{i=1}^{nk} x_i = -1 + \sum_{i=1}^{nk} \frac{y_i}{K_i} = 0$$

Bilanca tvari za kapljevitu fazu

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} = f(p, T, x_i, y_i)$$

Ravnotežne jednadžbe

Proračun kapljišta uz stalan tlak

Kombiniranje bilančnih i ravnotežnih jednadžbi

$$p, y_i \rightarrow T, x_i$$

$$p = \sum_{i=1}^{nk} x_i \gamma_i^L p_i^\bullet \exp \left[\frac{v_i^L (p - p_i^\bullet)}{RT} \right]$$

Metoda direktne iteracije

$$y_i = x_i \gamma_i^L p_i^\bullet \exp \left[\frac{v_i^L (p - p_i^\bullet)}{RT} \right]$$

$$y_i = y_i \quad x_i = \frac{y_i}{\frac{\gamma_i^L p_i^\bullet}{p} \exp \left[\frac{v_i^L (p - p_i^\bullet)}{RT} \right]}$$

Metoda pokušaja i pogreške

$$p < p \Rightarrow T = T + \Delta T$$

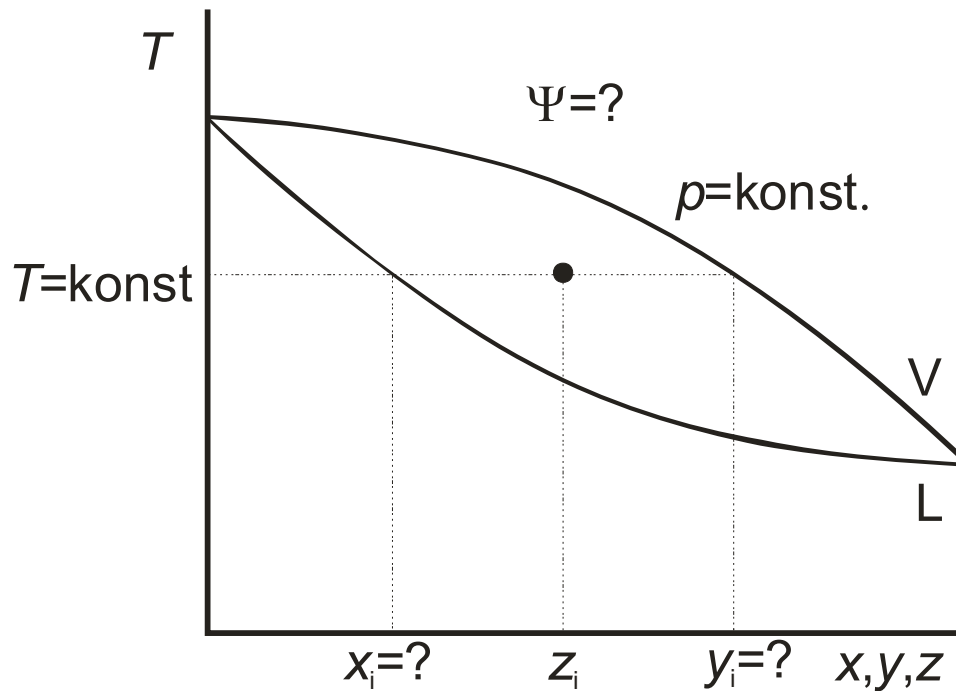
$$p > p \Rightarrow T = T - \Delta T$$

Metoda pokušaja i pogreške

Proračun jednokratnog isparavanja uz stalan tlak i temperaturu

npr. pri proračunu teorijske plitice destilacijske kolone

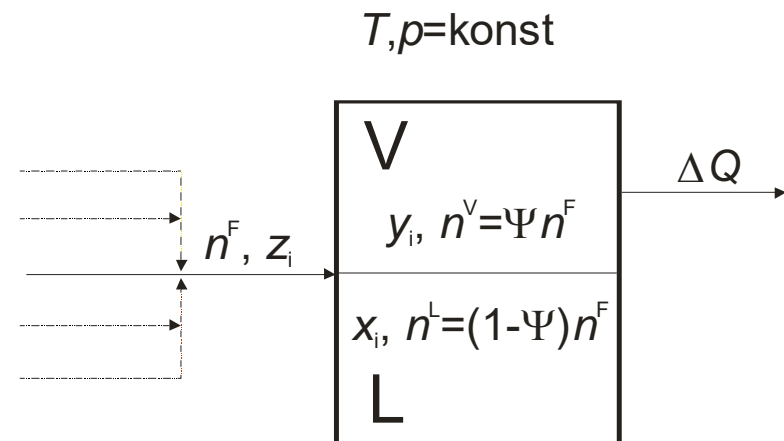
Isothermal flash problem



Formulacija

$$p, T, z_i \rightarrow x_i, y_i, \Psi$$

Broj nepoznanica: $2 \cdot nk + 1$



Proračun jednokratnog isparavanja uz stalan tlak i temperaturu

V	$n_2^V = 2 \text{ mol}$
	$n_1^V = 7 \text{ mol}$
<hr/>	
	$n_2^L = 5 \text{ mol}$
L	$n_1^L = 3 \text{ mol}$

$$x_1 = \frac{3}{3+5} \quad x_2 = \frac{5}{3+5}$$

$$y_1 = \frac{7}{7+2} \quad y_2 = \frac{2}{7+2}$$

$$z_1 = \frac{3+7}{3+5+7+2} \quad z_2 = \frac{5+2}{3+5+7+2}$$

$$\Psi = \frac{7+2}{3+5+7+2}$$

$$K_1 = \frac{\frac{7}{7+2}}{\frac{3}{3+5}} = \frac{56}{27}$$

$$K_2 = \frac{\frac{2}{7+2}}{\frac{5}{3+5}} = \frac{16}{45}$$

Proračun jednokratnog isparavanja uz stalan tlak i temperaturu

Jednadžbe $K_i = \frac{y_i}{x_i} = f(p, T, x_i, y_i)$ Ravnotežne jednadžbe

$$n_i^F = n_i^L + n_i^V$$

$$z_i n^F = x_i n^L + y_i n^V$$

Bilančne jednadžbe za komponente

$$z_i = (1 - \Psi) x_i + \Psi y_i$$

Jedna od tri bilančne jednadžbe za faze

$$\sum_{i=1}^{nk} x_i = 1 \quad \sum_{i=1}^{nk} y_i = 1 \quad \sum_{i=1}^{nk} y_i - \sum_{i=1}^{nk} x_i = 0$$

Rachford-Rice

Proračun jednokratnog isparavanja uz stalan tlak i temperaturu

Kombiniranje bilančnih jednadžbi s ravnotežnim

$$z_i = (1 - \Psi) \frac{y_i}{K_i} + \Psi y_i \quad z_i = (1 - \Psi) x_i + \Psi K_i x_i$$

$$y_i = \frac{K_i z_i}{1 + \Psi (K_i - 1)} \quad x_i = \frac{z_i}{1 + \Psi (K_i - 1)}$$

Kombiniranje s bilančnim uvjetom za faze

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

Proračun jednokratnog isparavanja uz stalan tlak i temperaturu

$$p, T, z_i \rightarrow x_i, y_i, \Psi$$

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

Newtonova metoda tangente

$$K_i = \frac{\gamma_i^L p_i^\bullet}{p} \exp \left[\frac{v_i^L (p - p_i^\bullet)}{RT} \right]$$

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

Metoda pokušaja i pogreške

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

Proračun jednokratnog isparavanja uz stalan tlak i entalpiju

npr. pri proračunu teorijske plitice destilacijske kolone u adijabatskim uvjetima

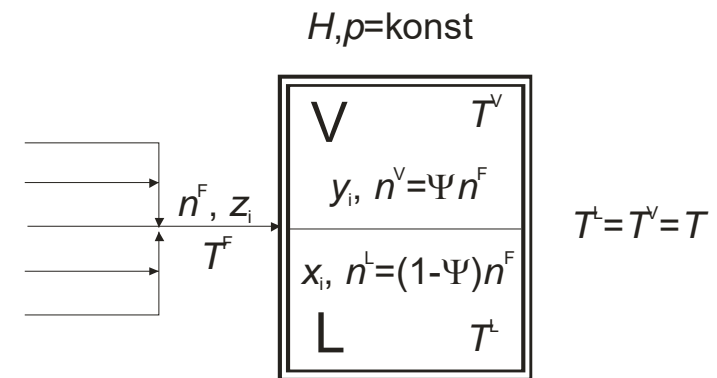
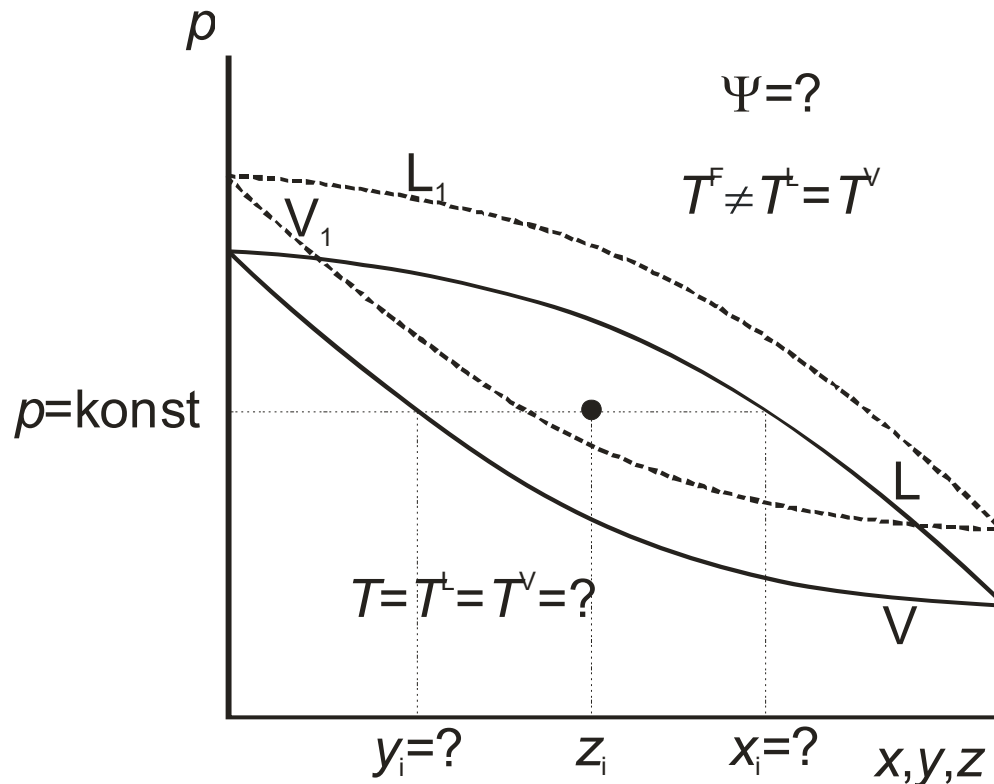
Adiabatic flash problem

- brza isparavanja
- isparavanja u izoliranim posudama

Formulacija

$$p, T^F, z_i \rightarrow x_i, y_i, \Psi, T$$

Broj nepoznanica: $2 \cdot nk + 2$



Proračun jednokratnog isparavanja uz stalan tlak i entalpiju

Jednadžbe $K_i = \frac{y_i}{x_i} = f(p, T, x_i, y_i)$ Ravnotežne jednadžbe

$$n_i^F = n_i^L + n_i^V$$

$$z_i n^F = x_i n^L + y_i n^V \quad \text{Bilančne jednadžbe za komponente}$$

$$z_i = (1 - \Psi) x_i + \Psi y_i$$

Rachford-Rice

$$\sum_{i=1}^{nk} x_i = 1 \quad \sum_{i=1}^{nk} y_i = 1 \quad \sum_{i=1}^{nk} y_i - \sum_{i=1}^{nk} x_i = 0 \quad \text{Jedna od tri bilančne jednadžbe za faze}$$

$$H^F(p, T, z_i) = H^L(p, T, x_i) + H^V(p, T, y_i)$$

Bilančna jednadžba za entalpiju

Proračun jednokratnog isparavanja uz stalan tlak i entalpiju

Formalizam rješavanja

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

$$K_i = f(T)$$

$$h_i^{\bullet L} = f(T)$$

$$h_i^{\bullet V} = f(T)$$

$$h_i^{\bullet F} = f(T^F)$$

$$g(\Psi, T) =$$

$$= \left(\sum_{i=1}^{nk} z_i h_i^{\bullet F} + h^{\text{ex},F} \right) - \left[(1 - \Psi) \left(\sum_{i=1}^{nk} x_i h_i^{\bullet L} + h^{\text{ex},L} \right) + \Psi \left(\sum_{i=1}^{nk} y_i h_i^{\bullet V} + h^{\text{ex},V} \right) \right] = 0$$

Sustav dviju jednačbi s dvjema nepoznanicama