

# Simulación de una planta de desalinización MSF aplicando el modelo eNRTL

## MSF Desalination Process Simulation using electrolyte-NRTL model

Doctorando:

**Jesús BIAIN**

<https://orcid.org/0000-0002-5009-3562>

CAIMI Centro de Aplicaciones Informáticas y Modelado en Ingeniería, Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Rosario, Zeballos 1346, S2000BQA Rosario, Argentina.

[jbain@frro.utn.edu.ar](mailto:jbain@frro.utn.edu.ar)

Director:

**Nicolás SCENNA**

Codirector:

**Juan Ignacio MANASSALDI**

### Resumen

El modelado convencional plantas de desalinización por destilación multietapa con evaporación súbita (MSF - *multi-stage flash*) se basa en correlaciones empíricas para estimar las propiedades termodinámicas del agua de mar. Dado que las unidades MSF operan mediante múltiples etapas de equilibrio líquido-vapor (o una aproximación a este), una representación precisa del fluido de trabajo resulta determinante para la calidad de la simulación. En este estudio se aplica un enfoque alternativo basado en el modelo NRTL para electrolitos (eNRTL), definiendo el agua de mar como una solución iónica acuosa ( $\text{Na}^+$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$ , entre otros) e incorporando coeficientes de actividad para describir el equilibrio de fases. El modelo fisicoquímico desarrollado para el agua de mar fue validado con datos experimentales en un amplio rango de composiciones y temperaturas y se utilizó aquí para simular la planta MSF Al Khobar II. La comparación de perfiles operativos (temperatura, salinidad, entre otros) arrojó errores inferiores al 3 %. El enfoque propuesto es aplicable en un rango de concentración, temperatura y presión más amplio, lo que ofrece una alternativa robusta para la representación fisicoquímica del agua de mar en la optimización del proceso de desalinización.

**Palabras clave:** Modelado; Simulación; eNRTL; MSF.

### Abstract

Conventional modeling of MSF desalination plants relies on empirical correlations to estimate seawater thermodynamic properties. However, since MSF units operate through multiple liquid–vapor equilibrium stages, an accurate representation of the working fluid is essential. This study applies an alternative approach based on the electrolyte Non-Random Two-Liquid (eNRTL) model, considering seawater as an aqueous ionic solution ( $\text{Na}^+$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$ , among others) and incorporating activity coefficients to describe phase behavior. The model, previously validated against experimental data over a wide range of compositions and temperatures, was applied here to simulate the Al Khobar II MSF plant, with errors under 3 %. The proposed approach is not restricted by concentration, temperature, or pressure; offering a robust alternative for the physicochemical representation of seawater in desalination process optimization.

**Keywords:** Modeling; Simulation; eNRTL; MSF.

## Introducción

Las plantas de desalinización por destilación multietapa con evaporación súbita (Multi-Stage Flash o MSF) se modelan habitualmente mediante un conjunto de correlaciones empíricas para la representación del equilibrio líquido-vapor y de los balances de materia y energía. Estas correlaciones, junto con aquellas empleadas para describir los fenómenos de transferencia de calor y la cantidad de vapor evaporado en cada etapa, constituyen la base para el diseño del equipo y la predicción de su desempeño operativo.

En la literatura se dispone de numerosas correlaciones empíricas para estimar las propiedades fisicoquímicas del agua de mar en función de variables tales como la temperatura y la salinidad. Si bien estas expresiones presentan una adecuada precisión dentro de las condiciones experimentales utilizadas para su desarrollo, su principal limitación radica en que su rango de aplicación se encuentra restringido al intervalo de temperaturas, salinidades y presiones para el cual fueron ajustadas, lo que dificulta su extrapolación a condiciones de operación diferentes.

Como alternativa a este enfoque, es posible recurrir a modelos termodinámicos rigurosos para la representación del comportamiento del agua de mar. En estos modelos, el agua de mar se considera una solución acuosa multicomponente de electrolitos disueltos, integrada principalmente por especies tales como  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{K}^+$  y  $\text{SO}_4^{2-}$ . Las propiedades termodinámicas del sistema se determinan a partir del cálculo de los coeficientes de actividad de las especies presentes, permitiendo obtener de manera consistente el equilibrio de fases y las propiedades de la mezcla. A diferencia de las correlaciones empíricas, este enfoque posee una base fisicoquímica teórica, garantiza la consistencia termodinámica entre las propiedades calculadas y ofrece una mayor capacidad de extrapolación a diferentes condiciones de operación y composiciones, resultando especialmente adecuado para el análisis, simulación y optimización de procesos de desalinización. Este enfoque constituye el adoptado en el presente trabajo.

Por otra parte, la planta MSF se representa mediante una sucesión de etapas, cada una de las cuales está compuesta por una cámara flash primaria, donde tiene lugar la evaporación de la salmuera, una cámara flash secundaria, que representa la evaporación adicional en la bandeja de destilación, y un condensador, en el que el vapor generado en ambas cámaras condensa cediendo calor a la corriente de alimentación de agua de mar y produciendo su precalentamiento, tal como puede verse en la formulación propuesta por Mussati et al. (2001).

En este contexto, el objetivo del presente trabajo es integrar el modelo termodinámico desarrollado por Biain et al. (2026) a un modelo riguroso de una planta de desalinización MSF con reciclo, con el propósito de realizar su simulación y establecer una plataforma adecuada para futuros estudios de optimización del proceso.

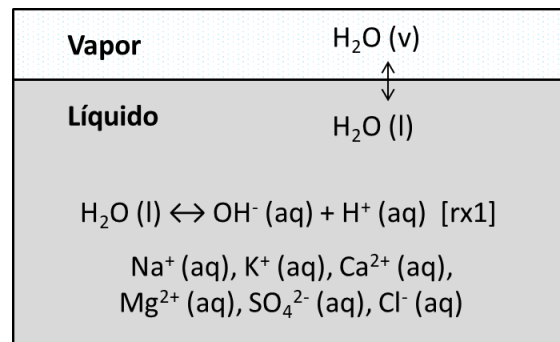
## Desarrollo

### Modelo termodinámico

De acuerdo con lo expuesto en Biain et al. (2026) el agua de mar se puede modelar como una solución electrolítica acuosa con los siguientes iones disueltos:  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Mg}^{++}$ ,  $\text{Ca}^{++}$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{SO}_4^{--}$  y  $\text{Cl}^-$ , cuya composición puede observarse en la Tabla 1. Siguiendo los lineamientos planteados en dicho trabajo de investigación, el equilibrio de fases que se produce dentro de cada cámara flash queda representado por las relaciones mostradas en la Fig. 1, donde el equilibrio Líquido-Vapor del agua se establece al igualarse las fugacidades de cada fase según se muestra en la Ec. 1.

| Componente         | Salinidad utilizada (g/kg) |
|--------------------|----------------------------|
| $\text{Cl}^-$      | 19,51285                   |
| $\text{Na}^+$      | 10,81581                   |
| $\text{SO}_4^{--}$ | 2,73479                    |
| $\text{Mg}^{++}$   | 1,28781                    |
| $\text{Ca}^{++}$   | 0,41339                    |
| $\text{K}^+$       | 0,40037                    |

**Tabla 1.** Composición del agua de mar.



**Figura 1.** Equilibrio líquido-vapor

$$\phi_w^v P = x_w \gamma_w \phi_{w,0}^{v,Psat} P_w^{sat} \theta_w \quad (1)$$

Aquí  $\phi_w^v$  y  $\phi_{w,0}^{v,Psat}$  refieren a los coeficientes de fugacidad del agua evaluados a la presión del sistema (P) y a la presión de vapor del agua pura a la temperatura del sistema (T), respectivamente;  $x_w$  es la fracción molar del agua en el líquido,  $\gamma_w$  es el coeficiente de actividad del agua,  $P_w^{sat}$  es la presión de vapor de agua pura evaluada a la temperatura del sistema, y  $\theta_w$  es el factor de corrección por presión (factor de Poynting). A su vez, el equilibrio de la reacción química mostrada en la Fig. 1 queda determinado por la Ec. 2.

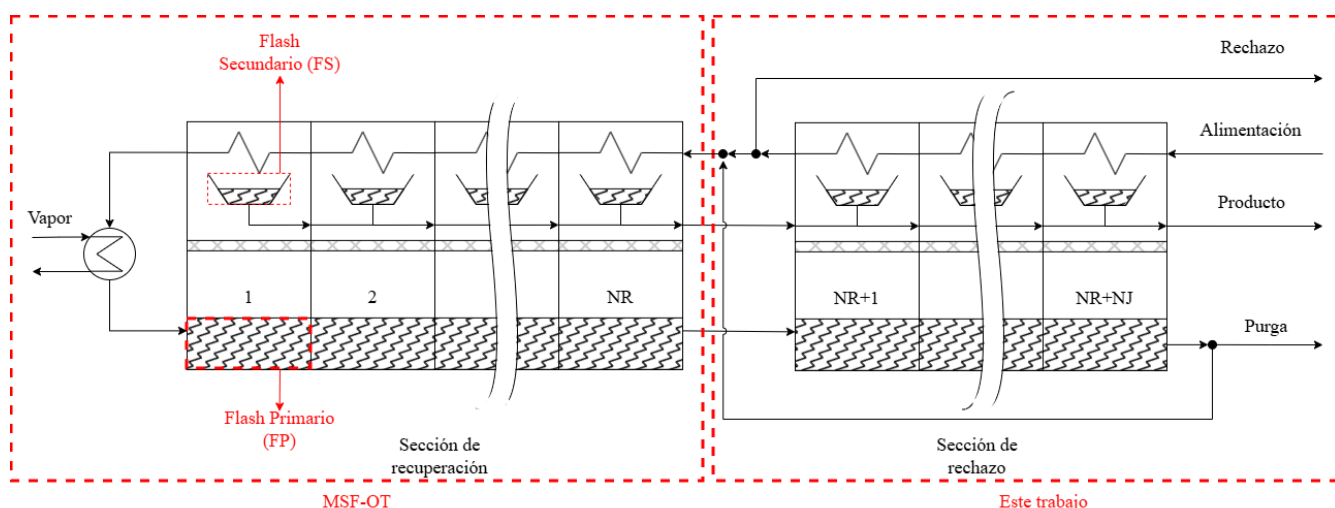
$$\ln k_{rx1} = 132,899 - \frac{13445,9}{T} - 22,4773 \ln T \quad (2)$$

Los coeficientes de actividad para el agua y los iones son calculados mediante el modelo eNRTL tal como se explica en Biain et al. (2026). Cabe destacar que tanto los coeficientes de fugacidad como las propiedades de la fase vapor son calculadas mediante la ecuación de estado de Redlich-Kwong. La presión de vapor de agua pura, por su parte, es estimada mediante la ecuación extendida de Antoine. Finalmente, el volumen molar del agua pura en estado líquido, utilizado para calcular el factor de Poynting, proviene de la ecuación de Rackett.

### Planta de desalinización MSF

A diferencia del trabajo de Biain et al. (2026), en el que se modeló una configuración de un solo paso (*OT - once-through*), en este trabajo se analiza una planta desalinizadora tipo MSF con recirculación (Fig. 2). Este proceso de desalinización multietapa es un sistema térmico que utiliza calor recuperado y fuentes de calor externas para calentar el agua de mar de alimentación. Una unidad de desalinización MSF consta de varias cámaras de evaporación flash agrupadas en dos zonas: una sección de recuperación y una sección de rechazo. Entre estas zonas, parte del agua de mar precalentada se desecha, mientras que otra parte se mezcla con una fracción de la salmuera final producida.

El modelado matemático de este tipo de proceso de desalinización se concibe como una serie de etapas; cada una compuesta por una cámara de evaporación primaria (FP) que representa la evaporación de la salmuera, una cámara de evaporación secundaria (FS) que representa la evaporación en la bandeja de destilación, un condensador donde se condensa el vapor de las cámaras, precalentando así el agua de mar de alimentación, y dos mezcladores. Para cada etapa, se plantean los balances de materia global y por componentes, el balance de energía y la ecuación de equilibrio de fases (Ec. 1). El desarrollo matemático es idéntico al mostrado en Biain et al. (2026) agregando las etapas intermedias cuyos índices van desde NR+1 hasta NR+NJ-1, donde NR representa el número total de etapas en la zona de recuperación y NJ en la de rechazo, y la etapa final de la zona de rechazo indicada por el índice NR+NJ.



**Figura 2.** Planta de desalinización MSF.

A diferencia del diseño de una planta tipo MSF-OT (sin recirculación) en el caso analizado en este trabajo deben incluirse un mezclador externo, un divisor externo que separa el agua marina rechazada, y un segundo divisor externo que separa el reciclo de la salmuera purgada. Los balances de materia por componentes y de energía de cada uno de estos tres equipos son expresados en las ecuaciones 3-8. Donde el subíndice  $i$  refiere a los componentes  $H_2O$ ,  $H^+$ ,  $OH^-$ ,  $Na^+$ ,  $Mg^{++}$ ,  $Ca^{++}$ ,  $K^+$ ,  $SO_4^{--}$  y  $Cl^-$ . Uno de los motivos principales para introducir el reciclo es reducir la cantidad de agentes a agregar para minimizar la deposición de sales en los tubos, aunque también se introducen complicaciones operativas para controlar el proceso. Por otra parte, es ampliamente conocida la dificultad que representa el modelado de estos sistemas MSF al introducir el reciclo y la corriente de rechazo mencionadas.

$$B_i^F + B_i^R = B_i^{ISW} \quad (3)$$

$$B^F \cdot H^{B,F} + B^R \cdot H^{B,R} = B^{ISW} \cdot H^{B,ISW} \quad (4)$$

$$B_i^{RSW_{NR+1}} = B_i^F + B_i^{SW} \quad (5)$$

$$B^{RSW_{NR+1}} \cdot H^{B,RSW_{NR+1}} = B^F \cdot H^{B,F} + B^{SW} \cdot H^{B,SW} \quad (6)$$

$$B_i^{FP_{NR+NJ}} = B_i^{BD} + B_i^R \quad (7)$$

$$B^{FP_{NR+NJ}} \cdot H^{B,FP_{NR+NJ}} = B^{BD} \cdot H^{B,BD} + B^R \cdot H^{B,R} \quad (8)$$

Donde  $B$  refiere al caudal másico de salmuera y  $H$  a la entalpia en base másica de dichas corrientes. Por otra parte, los superíndices  $SW$  se refieren al agua de mar rechazada en uno de los divisores externos,  $F$  a la otra corriente que sale de dicho divisor,  $R$  a la corriente de reciclo,  $ISW$  a la alimentación de agua de mar,  $RSW$  al agua de mar que atraviesa los condensadores,  $FP$  a las cámaras flash primarias, y  $BD$  a la purga.

## Resultados

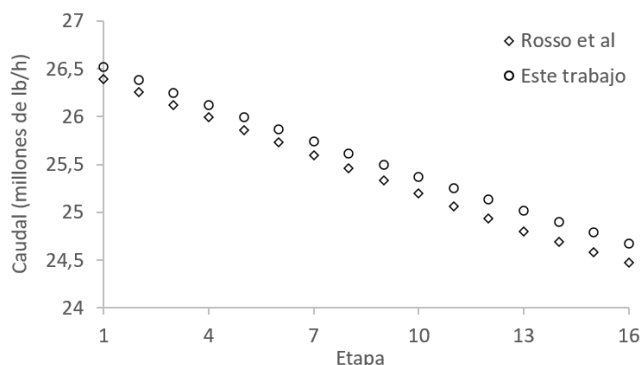
### Validación de la planta de desalinización MSF

Se implementó el modelo presentado en Rosso et al. (1997) en el software GAMS Development Corporation (2016) a los efectos de contrastar los resultados del modelo aquí presentado con el mismo. Para llevar a cabo esta comparación, se consideraron los parámetros mencionados en la Tabla 2.

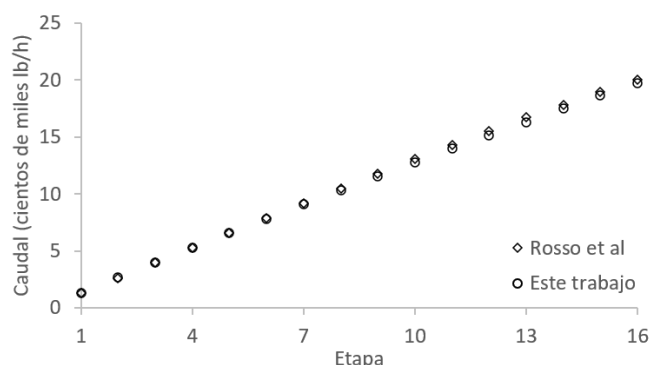
| Parámetro                                           | Valor             |
|-----------------------------------------------------|-------------------|
| Caudal de alimentación a la sección de rechazo      | 24.912,206 lb/h   |
| Caudal de alimentación a la sección de recuperación | 26.521.578,6 lb/h |
| Salinidad de entrada                                | 57.000 ppm        |
| Temperatura de alimentación a la sección de rechazo | 95 °F             |
| Número de etapas en la sección de recuperación      | 13                |
| Número de etapas en la sección de rechazo           | 3                 |
| Temperatura de la corriente que entra a la etapa 1  | 193,532 °F        |

**Tabla 2.** Parámetros asumidos.

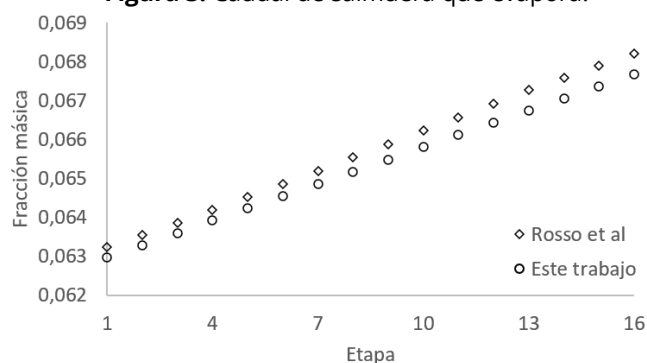
En las Figuras 3 a 8 se puede apreciar un alto grado de acuerdo entre ambos modelos. La mayor discrepancia se observa en la Figura 7, donde el error más significativo es inferior al 3%.



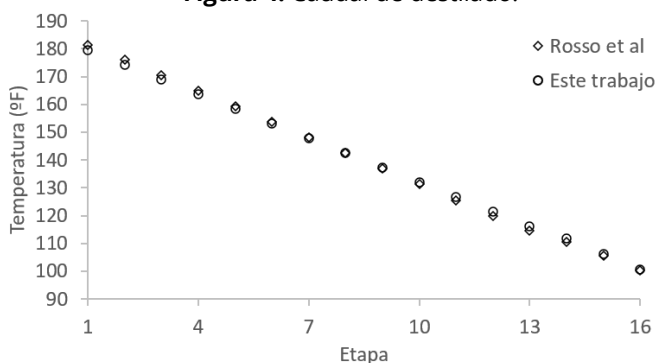
**Figura 3.** Caudal de salmuera que evapora.



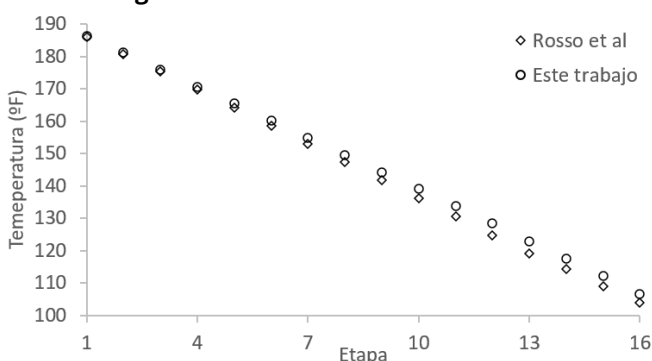
**Figura 4.** Caudal de destilado.



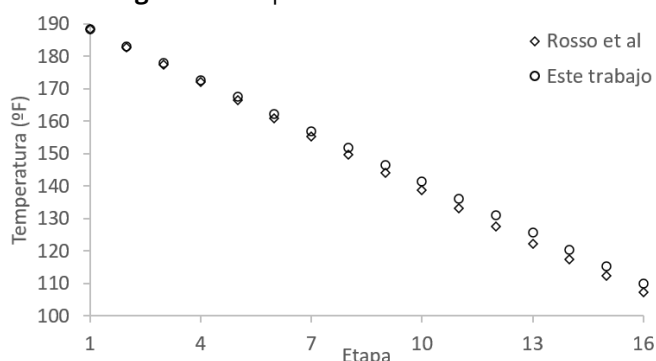
**Figura 5.** Concentración iónica en la salmuera.



**Figura 6.** Temperatura de la alimentación.



**Figura 7** Temperatura del destilado.



**Figura 8.** Temperatura de la salmuera que se evapora.

## Conclusiones

Al considerar el agua de mar como una solución electrolítica, el modelo eNRTL puede aplicarse para predecir su comportamiento en el equilibrio de fases líquido-vapor. La implementación de este modelo para simular una planta desalinizadora MSF, permitió el cálculo del equilibrio líquido-vapor y los balances de materia y energía. Dado que este

enfoque tiene una sólida base teórica y no está limitado por ninguna concentración, temperatura o presión, y los resultados muestran una alta concordancia con los datos experimentales, se puede concluir que representa una alternativa apropiada para la representación fisicoquímica del agua de mar y los procesos en los cuales se involucra. En trabajos futuros, el análisis se extenderá a otros tipos de plantas desalinizadoras y diversas configuraciones. Por ejemplo, la planta MSF (modelada usando el modelo e-NRTL implementado en GAMS) se acoplará a sistemas de generación de energía a los efectos de proceder a la síntesis óptima de procesos de desalinización duales; y finalmente, tales sistemas duales serán acoplados mediante diferentes modelos que describan los procesos de captura de dióxido de carbono contenidos en los gases exhaustos del sistema de generación utilizando la salmuera residual del proceso MSF.

## Utilización de IA generativa / herramientas IA

Declaro la utilización de la herramienta IA ChatGPT para su uso en la asistencia de la redacción del manuscrito, y su corrección gramatical y ortográfica. Confirmando que luego de la utilización, los contenidos obtenidos fueron revisados, constatados y editados, asumiendo plena responsabilidad por el contenido presentado en el presente trabajo.

## Referencias

Biaín, J. A., Manassaldi, J. I., y Scenna, N. J. (2026). Implementación del modelo de actividad eNRTL a agua de mar para el diseño de un desalador MSF. Memorias del Congreso Latinoamericano de Ingeniería y Ciencias Aplicadas 2026 (pp. 481-488).

GAMS Development Corporation. General Algebraic Modeling System (GAMS) Release 24.7.4, Fairfax, VA, USA, 2016.

Mussati, S., Aguirre, P., y Scenna, N. J. (2001). Optimal MSF plant design. *Desalination*, 138(1-3), 341-347.

Rosso, M., Beltramini, A., Mazzotti, M., y Morbidelli, M. (1997). Modeling multistage flash desalination plants. *Desalination*, 108(1):365–374. Annual Meeting of the European Desalination Society of Desalination and the Environment.