

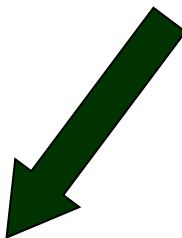
Parametrización. Software.

UNIDAD 7

Parametrizado

Asignación de valores a los parámetros de un modelo. En general, reproduciendo datos particulares o minimizando las diferencias con un conjunto de datos.

Cálculos, en comparación a datos

Correlación

Predicción

- Contexto de dónde se pueden utilizar los softwares
- ¿Por qué es importante que conozcan los diagramas de fases y softwares que los generan?
- Software compuestos puros
- Software mezclas binarias

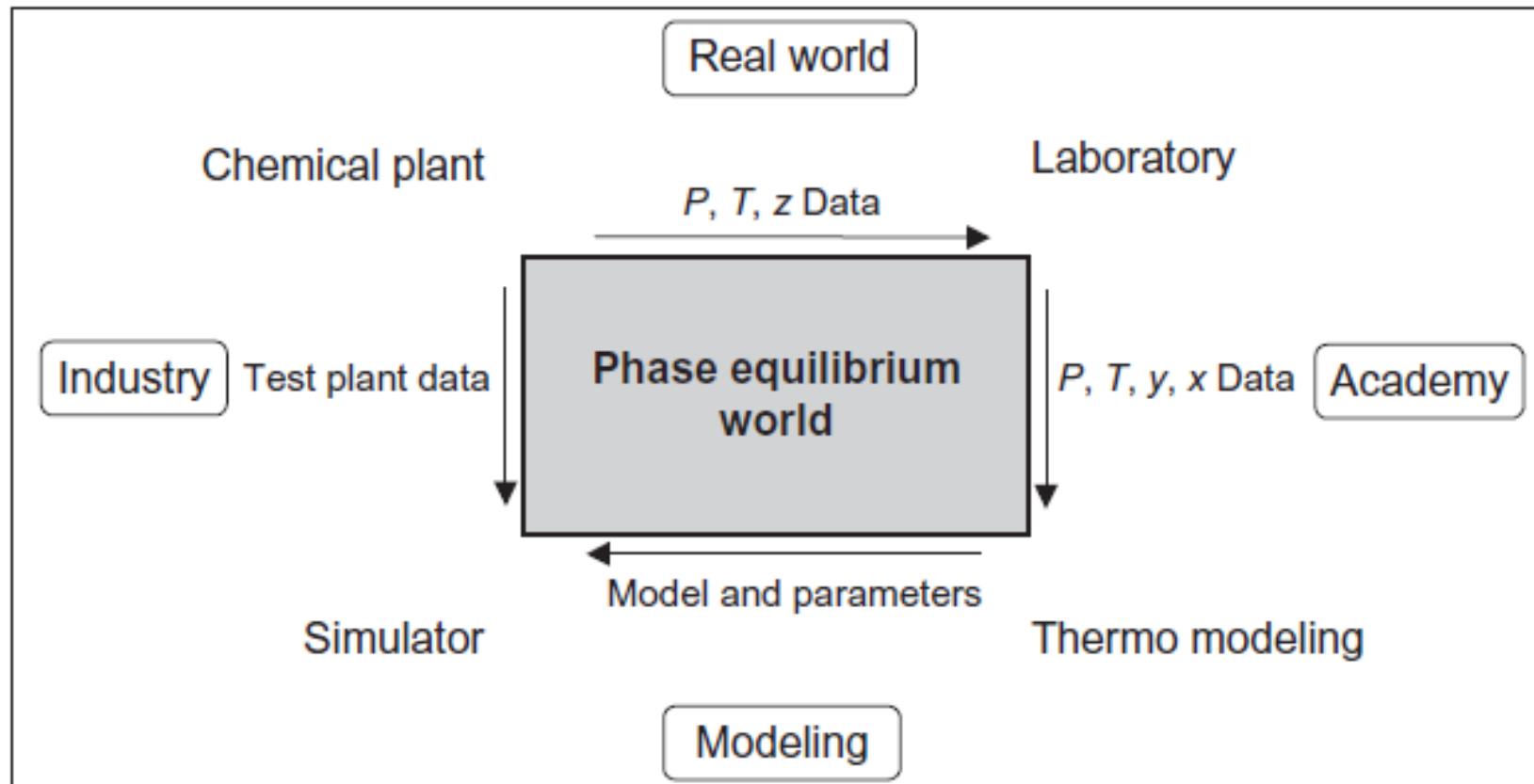


FIGURE 1.1 Phase equilibrium worlds: industry and academy in the real and engineering world.

Brignole, E. and S. Pereda, Phase Equilibrium Engineering. Supercritical Fluid Science and Technology, ed. E. Kiran. 2013: Elsevier. 347.

¿Qué puede involucrar un proceso en una planta química?

- Condiciones de P y T en que hay miscibilidad completa/separación
- Composición de las fases en equilibrio cuando hay separación
- Límites de estabilidad para una mezcla homogénea de composición definida



Fundamental conocer el comportamiento de fases en cada proceso o aplicación

¿De dónde sale o cómo se construye un diagrama de fases?

- Experimentos (t , \$)
- Cálculo a partir de modelos
- Combinación de ambos

Compuesto puro

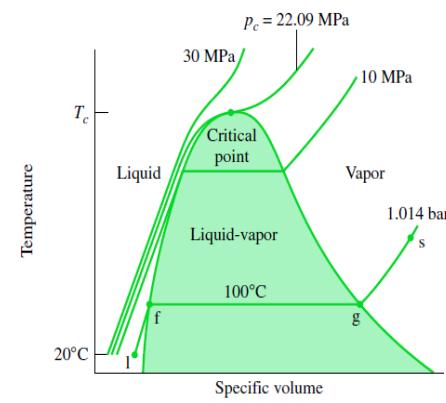
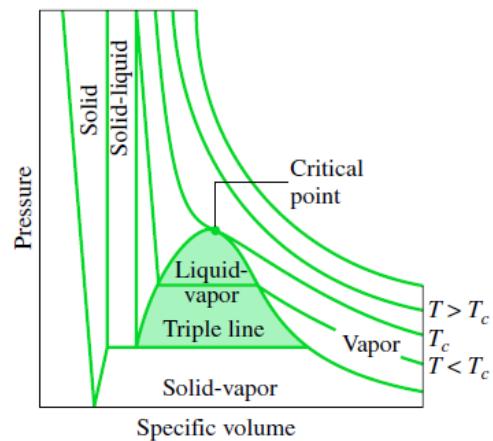
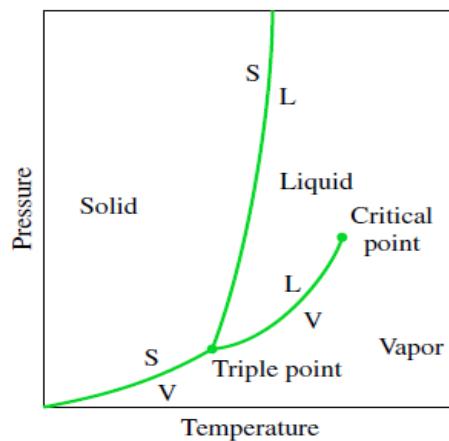
Tipos de Equilibrio

Punto crítico → 1 fase
 • Líquido-Vapor (L-V)

$$F=2+N-\pi-S=0 \rightarrow \text{Un punto}$$

Equilibrio de 2 fases:
 • Líquido-Vapor (L-V)

$$F=2+N-\pi-S=1 \rightarrow \text{Un línea}$$



Compuestos puros

Cálculo de equilibrio bifásico

$$T^\alpha = T^\beta$$

$$P^\alpha = P^\beta$$

$$\mu^\alpha = \mu^\beta \rightarrow f_i^\alpha = f_i^\beta \rightarrow \varphi^\alpha P = \varphi^\beta P$$

Métodos para el cálculo de fugacidades

Gases	Líquidos
1. Gases Ideales 2. Ecuaciones de Estado <ul style="list-style-type: none"> a. Ecuación del Virial b. Ecuaciones Cúbicas 	1. Modelos de G de exceso 2. Ecuaciones cúbicas

Ejemplo 1: Problema VI-3 – Serie de problemas

Preos.xlsx: Planilla Excel para cálculo de propiedades de compuestos puros (<http://chethermo.net/software>)

Fluido: CO₂ – Temperatura=150°C

P (bar)	Z	(z-1)/P	AREA	coef fug	fug (bar)
0	1	0,00000	0,00000	1,000	0,000
10	0,985	-0,00150	-0,00750	0,993	9,925
20	0,97	-0,00150	-0,02250	0,978	19,555
40	0,942	-0,00145	-0,05200	0,949	37,973
60	0,913	-0,00145	-0,08100	0,922	55,332
80	0,885	-0,00144	-0,10988	0,896	71,676
100	0,869	-0,00131	-0,13735	0,872	87,167
200	0,765	-0,00118	-0,26160	0,770	153,964
300	0,762	-0,00079	-0,36002	0,698	209,299
400	0,824	-0,00044	-0,42168	0,656	262,377
500	0,91	-0,00018	-0,45268	0,636	317,960

Sistemas binarios

Tipos de equilibrio

Equilibrio de 2 fases ó bifásico:

- Líquido-Vapor ($L-V$)
 - Líquido-Líquido ($L-L$)
- $\left. \begin{array}{l} \\ \end{array} \right\} F=2+N-\pi-S=2 \rightarrow \textcolor{red}{\text{Una superficie}}$

Caso particular \rightarrow Azeotropía $\rightarrow F=2+N-\pi-S=1 \rightarrow \textcolor{red}{\text{Una línea}}$

Equilibrio de 3 fases ó trifásico:

- Líquido-Líquido-Vapor ($L-L-V$)
- $\left. \begin{array}{l} \\ \end{array} \right\} F=2+N-\pi-S=2 \rightarrow \textcolor{red}{\text{Una línea}}$

Puntos críticos \rightarrow 1 fase

- Líquido-Vapor ($L-V$)
 - Líquido-Líquido ($L-L$)
- $\left. \begin{array}{l} \\ \end{array} \right\} F=2+N-\pi-S=1 \rightarrow \textcolor{red}{\text{Una línea}}$

Otros tipo de puntos

- Critical end point \rightarrow 2 fases
- $\left. \begin{array}{l} \\ \end{array} \right\} F=2+N-\pi-S=0 \rightarrow \textcolor{red}{\text{Un punto}}$

Sistemas binarios

Tipos de Diagramas que se pueden generar:

Globales (PT , Px , Tx , Pv , Tv)

Pxy (Isotermas)

Txy (isobaras)

PT (Isopletas)

Métodos para el cálculo de fugacidades

	Vapor	Líquido
Gas Ideal	$y_i P$	---
Solución Ideal	$y_i \phi_i^V P$	$x_i f_i^o$
Solución Real	$y_i \hat{\phi}_i^V P$	$y_i \hat{\phi}_i^L P$ ó $x_i \gamma_i f_i$

Ejemplo 1: Ejemplo 15.6 – Libro de Elliott y Lira

PrFug.xlsx: Planilla Excel para computo de fugacidades y otras propiedades (<http://chethermo.net/software>)

Sistema: Nitrógeno + Metano

$T=100\text{ K}$

$x_1=50\text{ \%}$

Consigna: Cálculo de Presión de burbuja.

GPEC (*Global Phase Equilibrium Calculation*)

¿Qué hace GPEC?

Genera diagramas binarios completos, representando fielmente lo que dice el modelo

NO da respuestas directas a problemas prácticos

NO genera “únicamente” los diagramas correctos
(si fuera así, no haría falta medir nunca más datos experimentales)

Es una herramienta de modelado, que bien usada, puede ayudar a encontrar respuestas a problemas.

Resuelve un problema (el otro queda en manos de usuario)

Ejercicio 1: Ejemplo 15.8 – Libro de Elliott y Lira

GPEC (descarga → LEV -Termodinámica Química 2013

Sistema: Metanol + Benceno

$P=1.013 \text{ bar (atmosférica)}$

$T=58 \text{ }^{\circ}\text{C}$

$x_1=y_1=61.4 \text{ \%}$

Azeótropo

Consigna: Reproducir este comportamiento con GPEC

Ecuación de Estado: Peng-Robinson

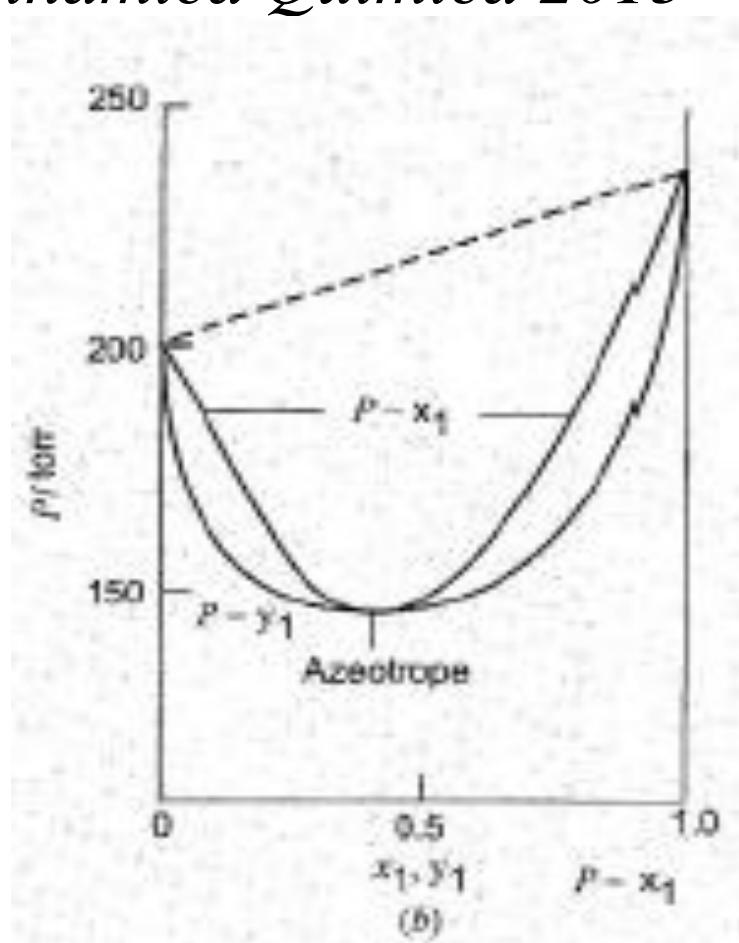
Ejercicio 2: Página 348-Smith and Van Ness

GPEC (descarga → LEV -Termodinámica Química 2013

Sistema: Cloroformo + Tetrahidrofunaro

$T=30^\circ C$

Consigna: Intentar reproducir este comportamiento, al menos cualitativamente, con GPEC



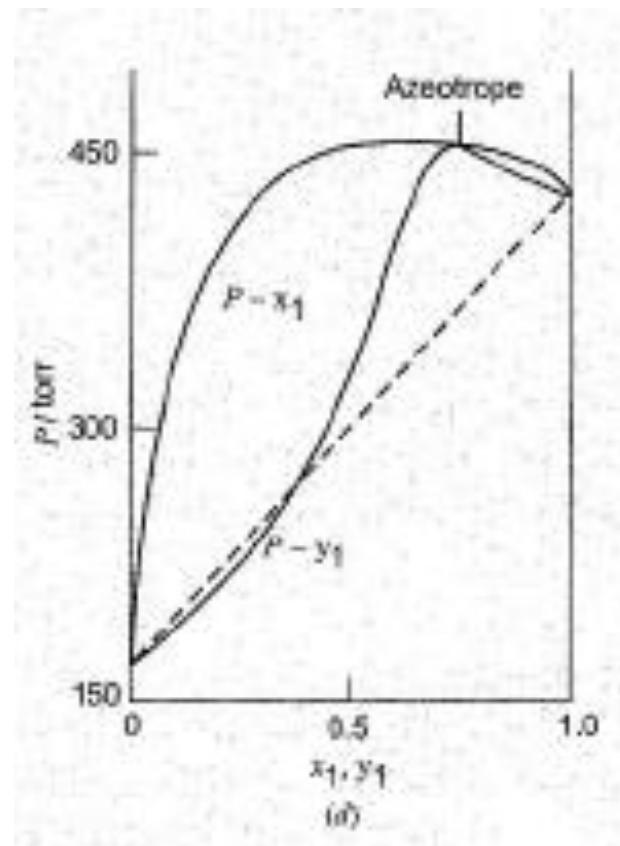
Ejercicio 3: Página 348-Smith and Van Ness

GPEC (descarga → LEV -Termodinámica Química 2013

Sistema: Etanol + Tolueno

$T=65^{\circ}\text{C}$

Consigna: Intentar reproducir este comportamiento, al menos cualitativamente, con GPEC



Ejercicio 4:

GPEC (descarga → LEV -Termodinámica Química 2013

Sistema: CO₂ + n-decano

Comportamiento Tipo II

Tucep:248.8 K

Consigna: Intentar reproducir la Tucep de forma cuantitativa utilizando GPEC