

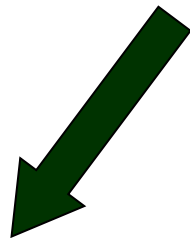
Parametrización. Software.

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

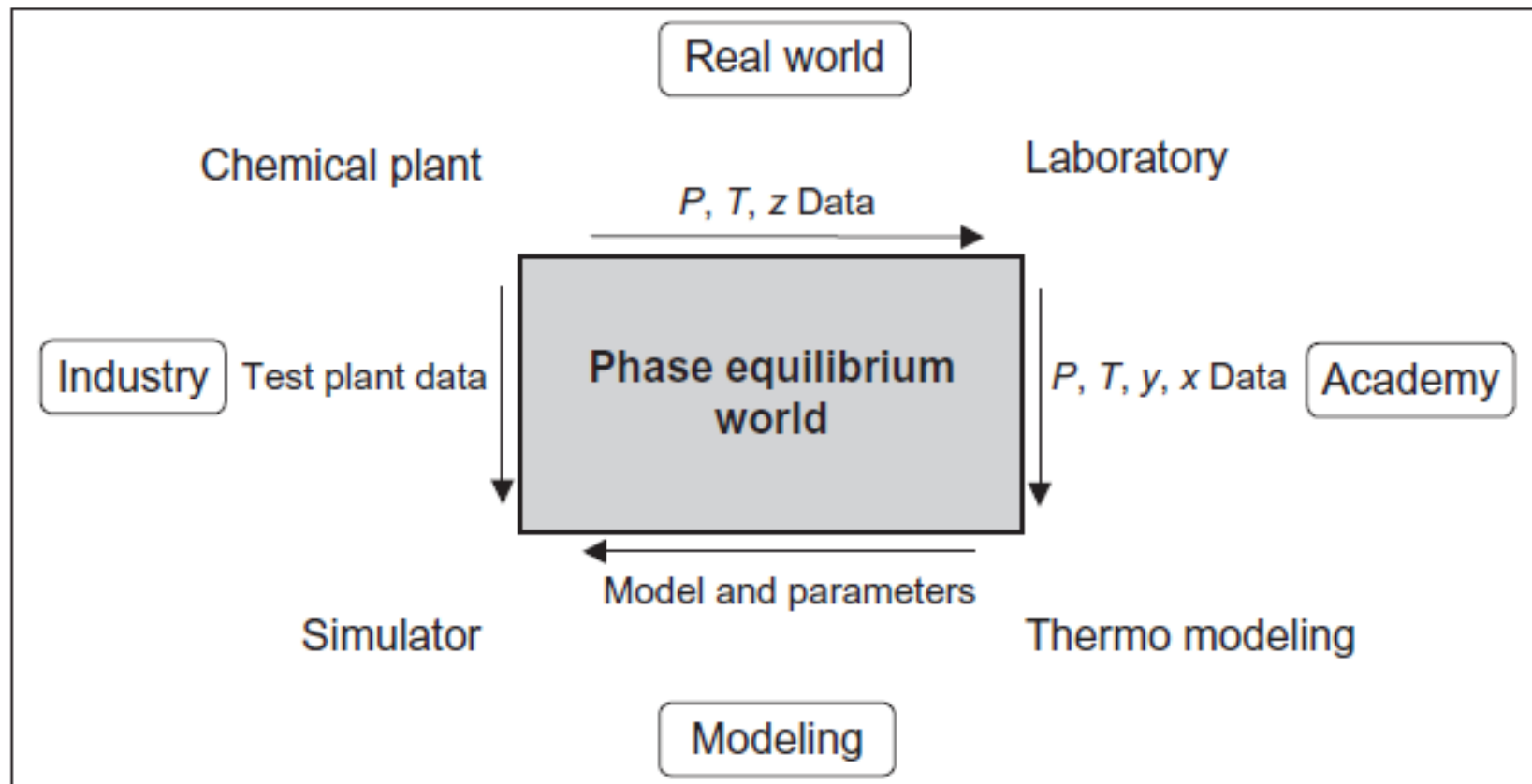


FIGURE 1.1 Phase equilibrium worlds: industry and academy in the real and engineering world.

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

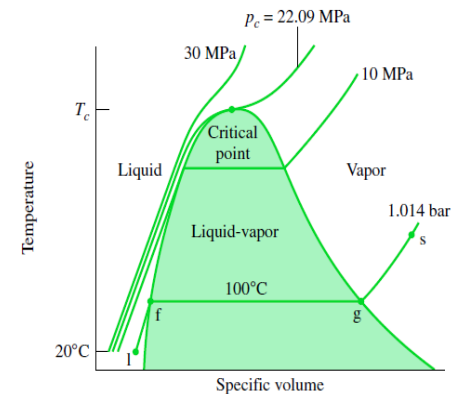
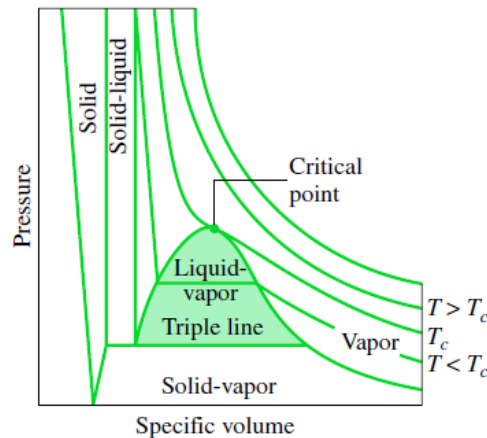
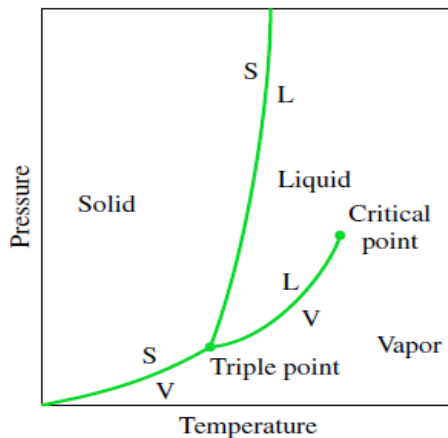
Tipos de Equilibrio

Punto crítico $\rightarrow 1$ fase } $F = 2 + N - \pi - S = 0 \rightarrow$ **Un punto**

- Líquido-Vapor (L-V)

Equilibrio de 2 fases: } $F = 2 + N - \pi - S = 1 \rightarrow$ **Un línea**

- Líquido-Vapor (L-V)



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

Caso particular \Rightarrow Azeotropía $\Rightarrow F=2+N-\pi-S=1 \Rightarrow$ Una línea

Equilibrio de 3 fases ó trifásico:

- Líquido-Líquido-Vapor (L-L-V)
- $$\left. \vphantom{\bullet \text{ Líquido-Líquido-Vapor (L-L-V)}} \right\} F=2+N-\pi-S=2 \Rightarrow \text{Una línea}$$

Puntos críticos \rightarrow 1 fase

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

Otros tipo de puntos

- Critical end point \rightarrow 2 fases
- $$\left. \vphantom{\bullet \text{ Critical end point} \rightarrow 2 \text{ fases}} \right\} F=2+N-\pi-S=0 \Rightarrow \text{Un punto}$$

Sistemas binarios

Tipos de Diagramas que se pueden generar:

Globales (P_T , P_x , T_x , P_v , T_v)

P_{xy} (Isotermas)

T_{xy} (isobaras)

P_T (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

$T=100\text{ K}$

$x_1=50\%$

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

<i>Sistema: Metanol + Benceno</i>	}	<i>Azeótropo</i>
<i>$P=1.013$ bar (atmosférica)</i>		
<i>$T=58$ °C</i>		
<i>$x_1=y_1=61.4$ %</i>		

Consigna: *Reproducir este comportamiento con GPEC*

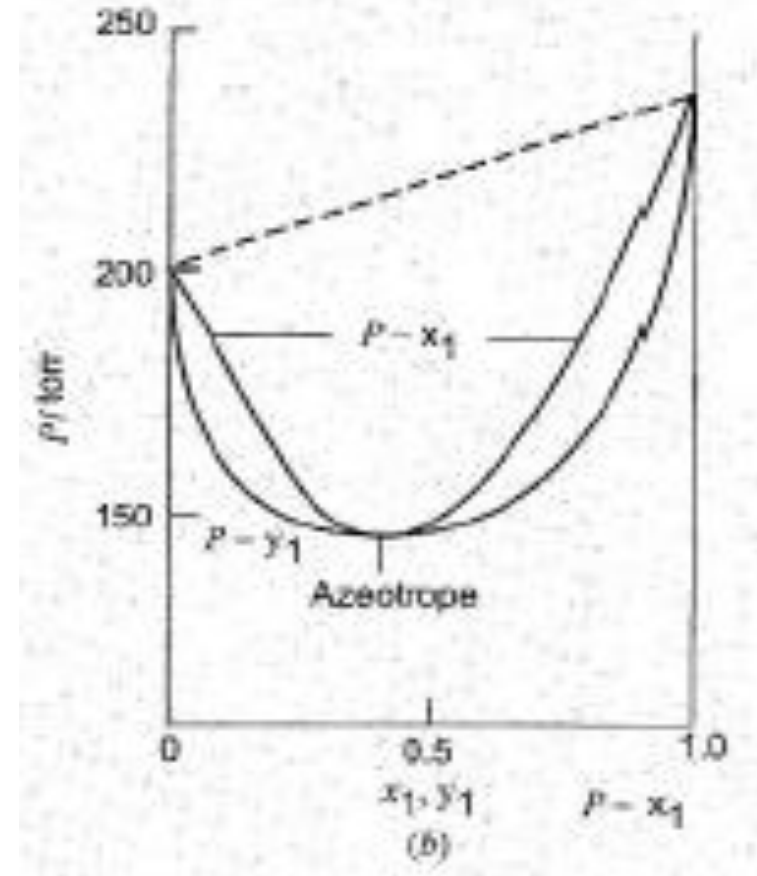
Ecuación de Estado: Peng-Robinson

Ejercicio 2: Página 348-Smith and Van Ness

GPEC (descarga → LEV -Termodinámica Química 2013

Sistema: Cloroformo + Tetrahidrofunaro
 $T=30^{\circ}\text{C}$

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



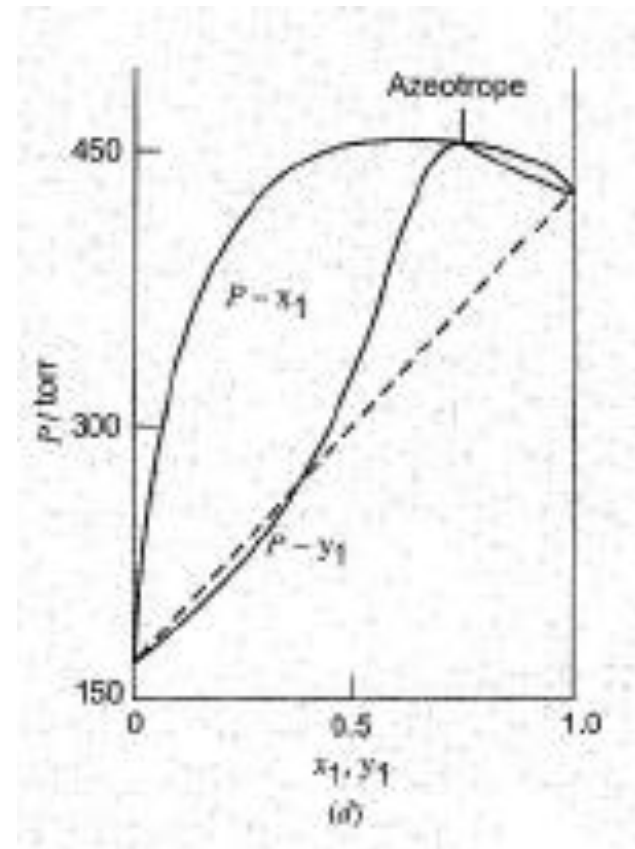
Ejercicio 3: Página 348-Smith and Van Ness

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*