

# Evaluación de Propiedades Físicas

FACULTAD DE INGENIERÍA  
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

## TRABAJO PRÁCTICO Primer cuatrimestre 2020

GRUPO N°:

1

1

B	A	C	A		V	I	L	L	A	R		X	I	M	E	N	A			9	3	2	0	8	
APELLIDO y NOMBRES																				PADRÓN					NOT A
C	A	P	R	A		F	R	A	N	C	O		D	A	N	I	E	L		9	9	6	4	2	
APELLIDO y NOMBRES																				PADRÓN					NOT A
E	S	P	E	R	O	N		R	A	M	I	R	O							9	9	1	6	4	
APELLIDO y NOMBRES																				PADRÓN					NOT A

	Fecha	Calificación <sup>1</sup>	Observaciones/Correcciones	Firma
Primera Entrega		A - Rev - NA		
Segunda Entrega		A - Rev - NA		
Calificación Final				

<sup>1</sup> A: Aprobado, Rev: Revisión, NA: No Aprobado.

**Índice.**

NOTACIÓN.....	página 3.
EJERCICIO 1.....	página 4.
Introducción 1.1.....	página 4.
Planteo y resolución del problema 1.1.....	página 4.
Resultados y discusión 1.1.....	página 6.
Conclusiones 1.1.....	página 13.
Introducción 1.2.....	página 14.
Planteo y resolución del problema 1.2.....	página 17.
Resultados y discusión 1.2.....	página 19.
Conclusiones 1.2.....	página 23.
Introducción 1.3.....	página .23
Planteo y resolución del problema 1.3.....	página .23
Resultados y discusión 1.3.....	página .26
Conclusiones 1.3.....	página .27
Introducción 1.4.....	página.27
Planteo y resolución del problema 1.4.....	página .28
Resultados y discusión 1.4.....	página .29
Conclusiones 1.4.....	página .30
EJERCICIO 2.....	página 31.
Introducción 2.1.....	página .31
Planteo y resolución del problema 2.1.....	página .31
Resultados y discusión 2.1.....	página .31
Conclusiones 2.1.....	página .33
Introducción 2.2.....	página 33.
Planteo y resolución del problema 2.2.....	página 33.
Resultados y discusión 2.2.....	página 34.
Conclusiones 2.2.....	página. 41
REFERENCIAS.....	página 42.

**Notación.**Símbolos latinos.

$P$	Presión [MPa]
$T$	Temperatura absoluta (K)
$Z$	Factor de compresibilidad
$x / y$	Fracción molar de un componente en el líquido / vapor
$POY$	Factor de corrección de Poynting
$g, h, s, u$	Energía libre de Gibbs, entalpía, entropía y energía interna (molares)
$h^r, s^r$	Entalpía residual, entropía residual
$W$	Potencia
$n$	Caudal molar

Símbolos griegos.

$\omega$	Factor acéntrico
$\gamma$	Coefficiente de actividad

## **1. USO DE LA ECUACIÓN DE PENG-ROBINSON PARA COMPONENTES PUROS**

### **Introducción 1.1.**

La ecuación de Peng-Robinson es capaz de representar el comportamiento tanto de líquido como vapor de componentes puros, abarcando un amplio intervalo de temperaturas y presiones. Para esto requiere el uso de propiedades del compuesto puro: temperatura crítica  $T_c$ , presión crítica  $P_c$  y el factor acéntrico  $w$  que se introduce a través de la función  $\alpha(T_r, w)$  como parámetro adicional.

En este ejercicio, se utilizará la ecuación de Peng-Robinson para calcular la presión de saturación, diagrama  $P - v$ , entalpía y entropía molares y coeficiente de fugacidad para una sustancia pura mediante el desarrollo de un software que permite calcularlos.

### **Planteo y resolución del problema 1.1.**

Se muestra a continuación la ecuación de Peng-Robinson y sus parámetros:

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a\alpha_{PR}}{V^2+2bV-b^2} \quad (1)$$

$$Z^3 - (1-B)Z^2 + (A-3B^2-2B)Z - (AB-B^2-B^3) = 0 \quad (2)$$

$$b = 0.0778 \frac{RT_c}{P_c} \quad (3)$$

$$\kappa = 0.37464 + 1.54226 w - 0.26992 w^2 \quad (4)$$

$$\alpha_{PR} = \left[ 1 + \kappa \left( 1 - \sqrt{\frac{T}{T_c}} \right) \right]^2 \quad (5)$$

$$a = 0.45724 \frac{R^2 T_c^2}{P_c} * \alpha_{PR} \quad (6)$$

$$\frac{da}{dT} = -0,45724 \frac{R^2 T_c^2}{P_c} k \left( \frac{\alpha_{PR}}{T \cdot T_c} \right)^{0,5} \quad (7)$$

$$A = \frac{aP}{(RT)^2} \quad (8)$$

$$B = \frac{bP}{RT} \quad (9)$$

$$h^r = h - h^{ig} = RT (Z - 1) + \frac{T \frac{da}{dT} - a}{b\sqrt{8}} \ln \ln \left[ \frac{Z+(1+\sqrt{2})B}{Z+(1-\sqrt{2})B} \right] \quad (10)$$

$$S^r = S - S^{ig} = R \ln \ln (Z - B) + \frac{\frac{da}{dT}}{b\sqrt{8}} \ln \ln \left[ \frac{Z+(1+\sqrt{2})B}{Z+(1-\sqrt{2})B} \right] \quad (11)$$

$$\ln (\hat{\phi}^\alpha) = (Z^\alpha - 1) - \ln \ln (Z^\alpha - B) - \frac{A}{\sqrt{8}B} \cdot \ln \left( \frac{Z^\alpha+(1+\sqrt{2})B}{Z^\alpha+(1-\sqrt{2})B} \right) \quad (12)$$

Dado que se requiere de la solución de ecuaciones no lineales, se debe dar un valor inicial a la presión. Con ese valor inicial, se calcularán las raíces de la ecuación de Peng-Robinson.

Para encontrar las raíces de la ecuación de Peng-Robinson se utiliza un método iterativo, dado que la ecuación tiene múltiples soluciones, la elección incorrecta de la solución inicial no llevará a la raíz buscada. En el caso del vapor, una buena estimación de la solución sería  $Z=1$  (gas ideal).

En el caso de buscar el factor de compresibilidad para el líquido, la elección más natural es  $Z=0$  (volumen despreciable).

Con los valores de  $Z_v$  y  $Z_l$  es posible calcular las propiedades de apartamiento: entalpía residual,  $h^r$ , entropía residual,  $s^r$ , y coeficientes de fugacidad,  $\hat{\phi}^\alpha$ .

Para una especie pura donde coexisten las fases líquido y vapor, estas están en equilibrio cuando están a la misma temperatura, presión y fugacidad:

$$\hat{f}_i^L = \hat{f}_i^V \quad (13)$$

Entonces:

$$\hat{\phi}_i^L = \hat{\phi}_i^V = \hat{\phi}_i^{SAT} \quad (14)$$

Definimos el error como:

$$error = \xi = \left| \hat{\phi}_i^V - \hat{\phi}_i^L \right| \quad (15)$$

Se calcula entonces la presión de saturación utilizando la función *fsolve* de Matlab que resuelve mi sistema de ecuaciones no lineales, haciendo que el error (Ecuación 15) sea mínimo.

Para la realización del diagrama  $P - v$  se usó la ecuación:

$$P = \frac{ZRT}{v} \quad (16)$$

Una vez calculado  $Z$  con la ecuación de Peng-Robinson (2) y fijados los valores de  $T$ ,  $T_c$ ,  $P_c$  y  $w$  para una sustancia pura, se toman distintos valores de  $v$  y el software realiza el gráfico.

El programa calculó las propiedades de apartamiento (entalpía residual, entropía residual y coeficiente de fugacidad) usando la ecuación de Peng-Robinson, ecuaciones (10), (11) y (12) respectivamente. Para obtener los valores totales de las dos primeras propiedades como pide el ejercicio, a los valores de apartamiento calculados se les debe sumar la propiedad del gas ideal.

Para el cálculo de la entalpía del gas ideal,  $h^{ig}$ , se usó la ecuación que utiliza el simulador Hysys:

$$h^{ig} = h_{ref} + \left( a + b.T + c.T^2 + d.T^3 + e.T^4 + f.T^5 \right) Mr \quad (17)$$

Siendo  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $d$ ,  $e$  y  $f$  las constantes del  $C_p^{ig}$ ,  $Mr$  el peso molecular de cada sustancia en kg/kmol y  $h_{ref}$  la entalpía de referencia también para cada sustancia en kJ/kmol.

Para el cálculo de la entropía del gas ideal tenemos:

$$\int_0^{S^{ig}} dS = \int_{T_0}^T C_p^{ig} \frac{dT}{T} - R \ln P \quad (18)$$

Necesitamos la expresión del  $C_p^{ig}$  y conociendo que la entalpía del gas ideal puede obtenerse a partir de la integración del  $C_p$ , podemos igualar:

$$\int_{h^{ref}}^{h^{ig}} dh = \int_{T^{ref}}^T C_p^{ig} dt = a + b.T + c.T^2 + d.T^3 + e.T^4 + f.T^5 \quad (19)$$

Si derivamos la expresión obtenemos  $C_p^{ig}$ :

$$C_p^{ig} = b + 2c.T + 3d.T^2 + 4e.T^3 + 5f.T^4 \quad (20)$$

Luego, a ese  $Cp^{ig}$  lo dividimos por  $T$  y luego lo integramos para obtener  $s^{ig}$ :

$$S^{ig} = \left( b \ln T + 2c \cdot T + 3d \cdot \frac{T^2}{2} + 4e \cdot \frac{T^3}{3} + 5f \cdot \frac{T^4}{4} \right) Mr - R \ln P \quad (21)$$

Finalmente se obtienen las entalpías y entropías totales como las sumas de las residuales más las ideales:

$$h_{FASE} = h^{ig} + h_{FASE}^r \quad (22)$$

$$S_{FASE} = S^{ig} + S_{FASE}^r \quad (23)$$

### **Resultados y discusión 1.1.**

A continuación, se muestran los resultados obtenidos de la presión de saturación y el coeficiente de fugacidad a distintas temperaturas, para ello se tomó al Propano como la sustancia pura:

Cálculo de: PRESIÓN DE SATURACIÓN ( $P_{sat}$ ) y COEFICIENTE DE FUGACIDAD ( $\phi$ )		
$T_c = 369.9K$ ; $P_c = 4.257MPa$ ; $w = 0.152$ ; $P_{inicial} = 0.3MPa$		
T(K)	$P_{sat}(Mpa)$	$\phi$
230	0.1262	0.9593
240	0.1730	0.9500
250	0.2180	0.9434
270	0.4300	0.9092
300	0.9987	0.8426
330	1.9935	0.7619
350	2.9716	0.7032
360	3.5749	0.6729

**Tabla 1:** Presiones de saturación y coeficientes de fugacidad del Propano calculados a distintas temperaturas.

En la tabla podemos observar que, para las distintas temperaturas elegidas, a medida que estas aumentan, la presión de saturación también aumenta como era de esperarse. Y así mismo el coeficiente de fugacidad decrece a medida que aumenta la presión.

A continuación, se muestran los resultados obtenidos de la entalpía molar y la entropía molar a distintas temperaturas, para ello se tomó al Propano como la sustancia pura:



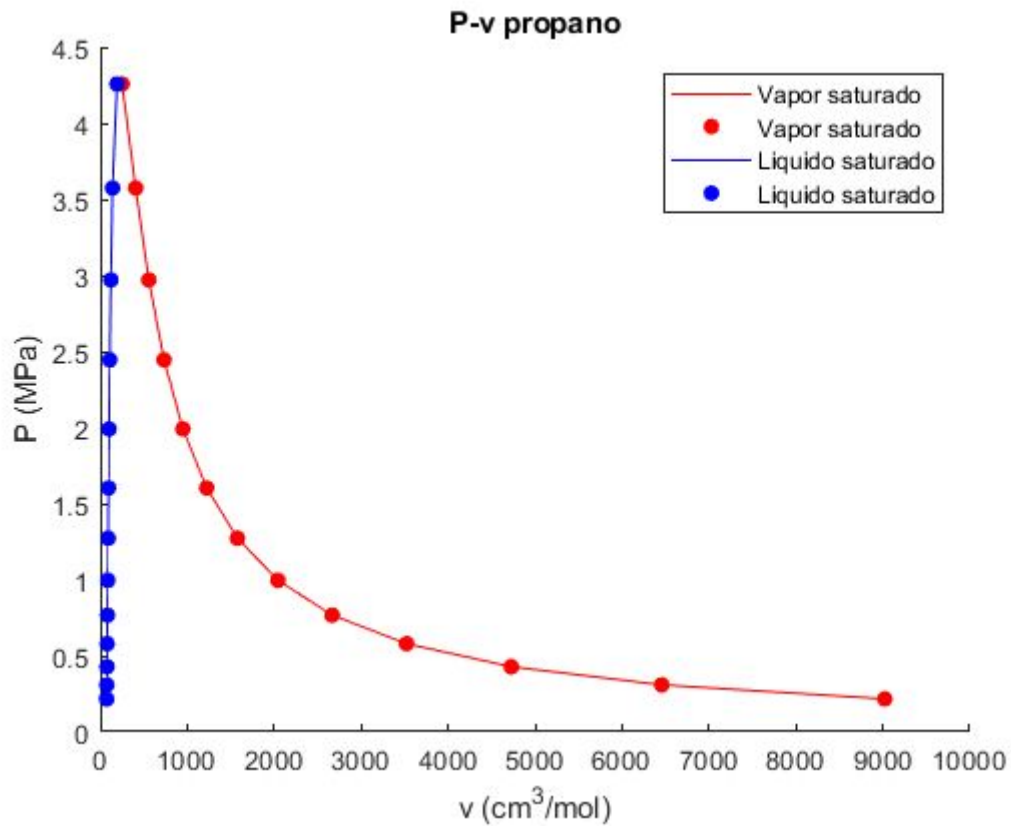
Cálculo de: ENTALPÍA MOLAR (kJ/kmol)					
$T_c = 369.9\text{K}$ ; $P_c = 4.257\text{MPa}$ ; $w=0.152$					
T(K)	h <sub>ideal</sub>	h <sub>rvap</sub>	h <sub>rliq</sub>	h <sub>vtotal</sub>	h <sub>ltotal</sub>
230	36996.16	-184.04	-17340.84	38812.12	19655.32
240	37331.94	-241.12	-15681.10	37090.77	21650.84
250	37687.03	-290.49	-15528.55	37396.54	22158.48
270	38455.32	-539.06	-15212.74	37916.26	23242.59
300	39753.46	-1190.89	-14471.45	38562.57	25282.01
330	41226.84	-2412.22	-13431.27	38814.63	27795.57
350	42306.48	-3865.06	-12163.31	38441.42	30143.17
360	42875.48	-5053.45	-11134.30	37822.03	31741.17

**Tabla 2:** Entalpía molar en ambas fases del Propano calculados a distintas temperaturas. Siendo h<sub>ideal</sub>: entalpía ideal, h<sub>rvap</sub>: entalpía residual en fase vapor, h<sub>rliq</sub>: entalpía residual en fase líquida, h<sub>vtotal</sub>: entalpía total molar en fase vapor, h<sub>ltotal</sub>: entalpía total molar en fase líquida.

Cálculo de: ENTROPÍA MOLAR (kJ/kmol.K)					
$T_c = 369.9\text{K}$ ; $P_c = 4.257\text{MPa}$ ; $w=0.152$					
T(K)	sideal	srvap	srliq	svtotal	slttotal
230	318.60	-0.4545	-75.038	318.14	243.56
240	318.62	-0.5785	-63.690	318.04	254.93
250	319.31	-0.6773	-61.621	318.63	257.69
270	318.82	-1.2044	-55.544	317.61	263.27
300	319.39	-2.5450	-46.810	316.85	272.58
330	321.07	-5.0481	-38.436	316.02	282.62
350	322.62	-8.1156	-31.825	314.51	290.80
360	323.50	-10.743	-27.634	312.76	295.86

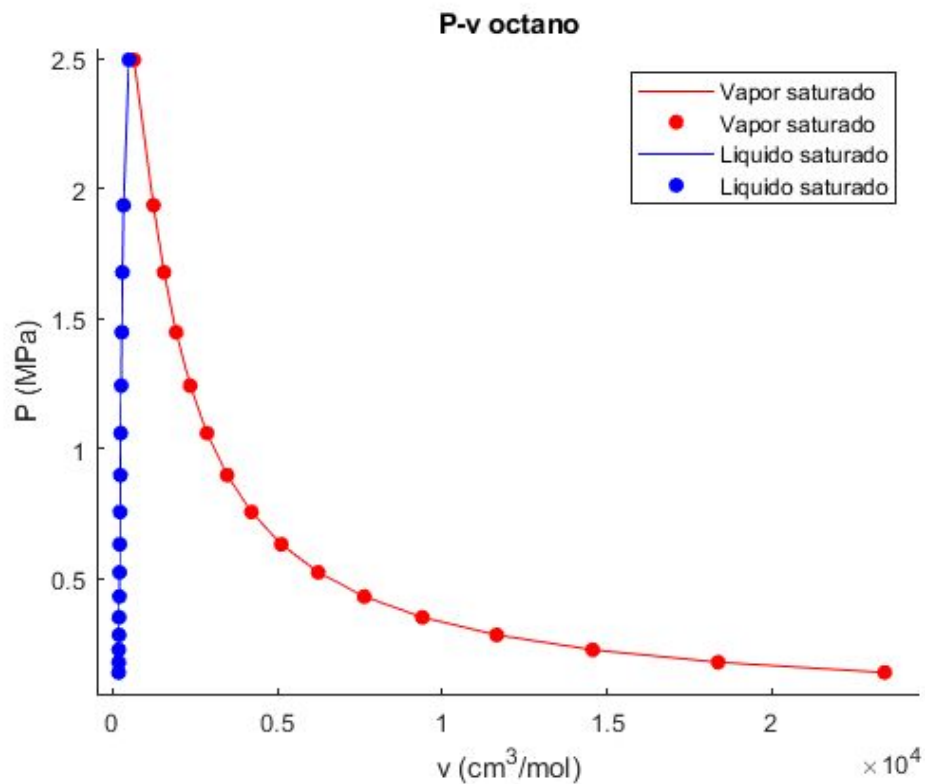
**Tabla 3:** Entropía molar en ambas fases del Propano calculados a distintas temperaturas. Siendo sideal: entropía ideal, srvap: entropía residual en fase vapor, srliq: entropía residual en fase líquida, svtotal: entropía total molar en fase vapor, slttotal: entropía total molar en fase líquida.

Se muestra el diagrama  $P - v$  para el Propano:



**Gráfico 1:** Diagrama  $P - v$  para Propano como sustancia pura.

Se muestra el diagrama  $P - v$  para el Octano:



**Gráfico 2:** Diagrama  $P - v$  para Octano como sustancia pura.

Se observa en el gráfico claramente la campana de Gauss característica de los diagramas  $P - v$  para las sustancias puras.

### **Conclusiones 1.1.**

Las propiedades calculadas con la ecuación de Peng-Robinson arrojaron datos esperados, por lo que el modelo predice de buena manera el comportamiento de sustancias puras, en nuestro caso Propano y Octano a presiones por debajo de la presión crítica.

**Introducción 1.2.**

El Manual del Ingeniero Química de Perry y Green brinda información acertada acerca de las propiedades de las sustancias. A partir de los datos obtenidos en esta bibliografía se compara con los calculados con el software desarrollado en el Ejercicio 1.1. Se compararon distintos puntos para: presión de vapor, volumen molar, entalpía y entropía molar.

A continuación, se muestran las tablas obtenidas de la bibliografía para las sustancias Propano y Octano respectivamente:

T, K	P, bar	$v_f, m^3/kg$	$v_g, m^3/kg$	$h_f, kJ/kg$	$h_g, kJ/kg$	$s_f, kJ/(kg \cdot K)$	$s_g, kJ/(kg \cdot K)$	$c_{p,f}, kJ/(kg \cdot K)$	$\mu_f, 10^{-4} Pa \cdot s$	$k_f, W/(m \cdot K)$
85.5 <sup>t</sup>	3.0 - 9	1.364 - 3	5.37 + 7	124.92	690.02	1.8738	8.3548	1.92		
90	1.5 - 8	1.373 - 3	1.12 + 7	133.56	693.58	1.9723	8.0953	1.92		
100	3.2 - 7	1.392 - 3	5.85 + 5	152.74	702.23	2.1743	7.6163	1.93		
110	3.9 - 6	1.412 - 3	53275	172.03	711.71	2.3581	7.2377	1.94		
120	3.1 - 5	1.432 - 3	7350	191.46	721.78	2.5271	6.9343	1.95		
130	1.8 - 4	1.453 - 3	1400	211.03	732.27	2.6838	6.6885	1.96		
140	7.7 - 4	1.475 - 3	344	230.77	743.07	2.8300	6.4881	1.98		
150	2.74 - 3	1.497 - 3	103	250.67	754.12	2.9674	6.3237	2.00	6.61	0.191
160	8.22 - 3	1.521 - 3	36.8	270.78	765.37	3.0971	6.1886	2.02	5.54	0.183
170	0.0214	1.545 - 3	15.0	291.10	776.80	3.2202	6.0775	2.04	4.67	0.175
180	0.0495	1.570 - 3	6.84	311.66	788.40	3.3377	5.9862	2.07	3.97	0.166
190	0.1035	1.597 - 3	3.43	332.48	800.15	3.4503	5.9114	2.10	3.27	0.158
200	0.1993	1.625 - 3	1.868	353.61	812.03	3.5586	5.8502	2.13	2.98	0.150
210	0.3574	1.654 - 3	1.087	375.07	824.01	3.6631	5.8005	2.16	2.65	0.143
220	0.6031	1.686 - 3	0.669	396.90	836.04	3.7645	5.7603	2.20	2.36	0.136
230	0.9661	1.719 - 3	0.432	419.16	848.08	3.8631	5.7280	2.25	2.07	0.129
240	1.4800	1.754 - 3	0.290	442.07	860.07	3.9605	5.7022	2.29	1.86	0.123
250	2.1819	1.792 - 3	0.2020	465.58	871.94	4.0563	5.6817	2.34	1.69	0.117
260	3.1118	1.833 - 3	0.1445	489.70	883.62	4.1505	5.6656	2.41	1.53	0.111
270	4.3120	1.878 - 3	0.1059	514.45	895.02	4.2433	5.6528	2.48	1.40	0.106
280	5.8278	1.927 - 3	0.0791	539.88	906.03	4.3349	5.6426	2.56	1.29	0.100
290	7.7063	1.982 - 3	0.0600	566.06	916.54	4.4257	5.6343	2.65	1.19	0.096
300	9.9973	2.044 - 3	0.0461	593.11	926.41	4.5160	5.6270	2.76	1.10	0.091
310	12.75	2.115 - 3	0.0357	621.18	935.45	4.6062	5.6200	2.89	0.93	0.086
320	16.03	2.200 - 3	0.0279	650.49	943.38	4.6971	5.6124	3.06	0.82	0.082
330	19.88	2.301 - 3	0.0218	681.37	949.79	4.7896	5.6030	3.28	0.72	0.078
340	24.36	2.430 - 3	0.0170	714.38	953.92	4.8850	5.5896	3.62	0.62	0.073
350	29.56	2.607 - 3	0.0130	750.52	954.23	4.9861	5.5681	4.23	0.52	0.069
360	35.55	2.896 - 3	0.0095	792.50	946.56	5.0997	5.5277	5.98	0.40	0.066
369.8 <sup>c</sup>	42.42	4.566 - 3	0.0046	879.20	879.20	5.3300	5.3300	$\infty$	0.29	$\infty$

**Tabla 4:** Propiedades del Propano obtenidas del Manual del Ingeniero Químico de Perry y Green.

T, K	P, bar	$v_f, m^3/kg$	$v_g, m^3/kg$	$h_f, kJ/kg$	$h_g, kJ/kg$	$s_f, kJ/(kg \cdot K)$	$s_g, kJ/(kg \cdot K)$	$c_{p,f}, kJ/(kg \cdot K)$	$\mu_f, 10^{-4} Pa \cdot s$	$k_f, W/(m \cdot K)$
216.4 <sup>f</sup>	1.49 - 5			365.9		2.487		2.033	2.25	0.149
220	2.41 - 5			373.2		2.520		2.035	2.01	0.148
240	2.18 - 4	1.353 - 3	700	414.1	811.4	2.698	4.207	2.059	1.24	0.143
260	0.0014	1.368 - 3	125	455.8	842.1	2.865	4.259	2.105	0.87	0.138
280	0.0061	1.384 - 3	31.9	498.4	873.5	3.023	4.312	2.165	0.65	0.133
300	0.0207	1.420 - 3	10.7	542.4	906.2	3.175	4.366	2.231	0.504	0.128
320	0.0575	1.457 - 3	4.01	589.8	939.8	3.325	4.419		0.405	0.123
340	0.1384	1.495 - 3	1.752	637.9	974.6	3.471	4.461		0.334	0.118
360	0.3000	1.536 - 3	0.844	687.1	1010.4	3.611	4.509		0.282	0.112
380	0.5856	1.582 - 3	0.448	737.7	1047.3	3.747	4.562		0.244	0.107
400	1.0507	1.632 - 3	0.252	790.1	1084.8	3.881	4.617		0.200	0.102
420	1.758	1.685 - 3	0.155	843.1	1123.6	4.010	4.677		0.167	0.099
440	2.797	1.747 - 3	0.100	897.5	1162.5	4.137	4.740		0.143	0.095
460	4.246	1.818 - 3	0.066	954.8	1202.0	4.264	4.802		0.121	0.091
480	6.201	1.904 - 3	0.045	1013.5	1241.8	4.388	4.864		0.103	0.087
500	8.785	2.013 - 3	0.031	1072.8	1281.2	4.508	4.924		0.086	0.083
520	12.15	2.16 - 3	0.021	1136.0	1318.6	4.629	4.980		0.072	
540	16.46	2.37 - 3	0.014	1201.5	1352.4	4.749	5.028		0.058	
560	21.98	2.81 - 3	0.008	1276.7	1370.4	4.880	5.048		0.044	
568.8 <sup>c</sup>	24.97	4.26 - 3	0.004	1331.7	1331.7	4.977	4.977			

**Tabla 5:** Propiedades del Octano obtenidas del Manual del Ingeniero Químico de Perry y Green.

### Planteo y resolución del problema 1.2.

El planteo y la resolución del problema para el cálculo de la presión de vapor, entalpía y entropía molar es de manera análoga al Ejercicio 1.1. Para el cálculo del volumen molar se utilizó la ecuación (16) de donde se despejó el volumen molar, quedando así:

$$v = \frac{ZRT}{P} \quad (24)$$

Luego, una vez calculados los distintos valores de la presión de vapor, volumen molar, entalpía y entropía molar para las sustancias puras: Propano y Octano; se realiza la comparación de los datos obtenidos con los datos de tablas de bibliografía.

### Resultados y discusión 1.2.

Se muestran a continuación las tablas con las propiedades calculadas y con los datos obtenidos de bibliografía para el Propano:

Cálculo de: PRESIÓN DE VAPOR (MPa) - PROPANO		
Tc = 369.9K; Pc= 4.257MPa; w=0.152		
T(K)	Pv(MPa) BIBLIOGRAFÍA	Pv(MPa) CALCULADO
170	0.00214	0.00361
200	0.01993	0.0140
230	0.0966	0.1262
240	0.1480	0.1730
250	0.2182	0.2180
270	0.4312	0.4300
300	0.9997	0.9987
330	1.988	1.994
350	2.956	2.971
360	3.555	3.575

**Tabla 6:** Propiedades del Propano calculadas y obtenidas del Manual del Ingeniero Químico de Perry y Green. Pv: Presión de vapor.

Cálculo de: ENTALPÍA MOLAR (kJ/kmol) - PROPANO				
$T_c = 369.9\text{K}$ ; $P_c = 4.257\text{MPa}$ ; $w=0.152$				
T(K)	hv bibliografia	hv calculado	hl bibliografia	hl calculado
170	34256.88	35376.48	12837.51	12045.96
200	35810.52	36080.56	15594.20	15897.34
230	37400.33	36812.12	18043.96	19655.32
240	37929.09	37090.77	19495.29	21650.84
250	38452.55	37396.54	20532.08	22158.48
270	39470.38	37916.26	22687.25	23242.59
300	40854.68	38562.57	26156.15	25282.01
330	41885.74	38814.63	30048.42	27795.57
350	42081.54	38441.42	33097.93	30143.17
360	41743.30	37822.03	34949.25	31741.18

**Tabla 7:** Propiedades del Propano calculadas y obtenidas del Manual del Ingeniero Químico de Perry y Green. Siendo hv: entalpía del vapor, hl: entalpía del líquido.



Cálculo de: ENTROPÍA MOLAR (kJ/kmol.K) - PROPANO				
Tc = 369.9K; Pc= 4.257MPa; w=0.152				
T(K)	sv bibliografía	sv calculado	sl bibliografía	sl calculado
170	268.02	331.53	142.01	115.49
200	257.99	328.69	156.93	122.99
230	252.60	318.14	170.36	243.56
240	251.47	318.03	174.66	254.93
250	250.56	318.63	178.88	257.68
270	249.29	317.61	187.13	263.27
300	248.15	316.85	199.16	272.58
330	247.09	316.02	211.22	282.62
350	245.55	314.51	219.89	290.80
360	243.77	312.76	224.90	295.86

**Tabla 8:** Propiedades del Propano calculadas y obtenidas del Manual del Ingeniero Químico de Perry y Green. Siendo sv: entropía del vapor, sl: entropía del líquido.

Cálculo de: VOLUMEN MOLAR (m <sup>3</sup> /kmol) - PROPANO				
T <sub>c</sub> = 369.9K; P <sub>c</sub> = 4.257MPa; w=0.152				
T(K)	V <sub>v</sub> bibliografía	V <sub>v</sub> calculado	V <sub>l</sub> bibliografía	V <sub>l</sub> calculado
170	661.5000	0.0641	0.0680	0.0641
200	82.3800	1191.9279	0.0720	0.0000
230	19.0500	14.5108	0.0760	0.0619
240	12.7900	10.9292	0.0774	0.0623
250	8.9080	8.9657	0.0790	0.0735
270	4.6700	4.7034	0.0828	0.0773
300	2.0300	2.0361	0.0900	0.0866
330	0.9600	0.9483	0.1010	0.1016
350	0.5733	0.5570	0.1150	0.1219
360	0.4200	0.4067	0.1277	0.1412

**Tabla 9:** Propiedades del Propano calculadas y obtenidas del Manual del Ingeniero Químico de Perry y Green. Siendo V<sub>v</sub>: volumen molar del vapor, V<sub>l</sub>: volumen molar del líquido.

Se muestran a continuación las tablas con las propiedades calculadas y con los datos obtenidos de bibliografía para el Octano:

Cálculo de: PRESIÓN DE VAPOR (MPa) - OCTANO		
$T_c = 568.6K$ ; $P_c = 2.497MPa$ ; $w=0.4015$		
T(K)	Pv(MPa) BIBLIOGRAFÍA	Pv(MPa) CALCULADO
280	0.0061	0.0000
300	0.0021	0.0265
340	0.0138	0.0347
380	0.0586	0.0756
400	0.1051	0.1109
420	0.1758	0.1763
460	0.4246	0.4293
500	0.8785	0.8972
540	1.6460	1.6786
560	2.1980	2.2243

**Tabla 10:** Propiedades del Octano calculadas y obtenidas del Manual del Ingeniero Químico de Perry y Green. Pv: Presión de vapor.

Cálculo de: ENTALPÍA MOLAR (kJ/kmol) - OCTANO				
Tc = 568.6K; Pc= 2.497MPa; w=0.4015				
T(K)	hv bibliografía	hv calculado	hl bibliografía	hl calculado
280	99753.7	106553.8	56917.3	60420.5
300	103488.0	106705.2	61942.1	67627.5
340	111299.3	108208.3	72848.2	68323.4
380	119601.7	110838.5	84245.3	79356.0
400	123884.2	112556.9	90229.4	81249.9
420	128315.1	114459.3	96282.0	86899.9
460	137268.4	118686.9	109038.2	93155.4
500	146313.0	123181.2	122513.8	100888.8
540	154444.1	126997.3	137211.3	111066.0
560	156499.7	127455.5	145799.1	118226.2

**Tabla 11:** Propiedades del Octano calculadas y obtenidas del Manual del Ingeniero Químico de Perry y Green. Siendo hv: entalpía del vapor, hl: entalpía del líquido.

Cálculo de: ENTROPÍA MOLAR (kJ/kmol.K) - OCTANO				
Tc = 568.6K; Pc= 2.497MPa; w=0.4015				
T(K)	sv bibliografía	sv calculado	sl bibliografía	sl calculado
280	492.43	534.83	345.23	324.44
300	498.60	528.39	362.59	438.79
340	509.45	537.96	396.39	452.67
380	520.98	542.86	427.91	460.02
400	527.26	545.22	443.21	465.28
420	534.11	546.70	457.94	481.08
460	548.39	549.22	486.95	493.72
500	562.32	551.70	514.81	507.11
540	574.20	552.42	542.34	522.92
560	576.48	550.12	557.30	533.64

**Tabla 12:** Propiedades del Octano calculadas y obtenidas del Manual del Ingeniero Químico de Perry y Green. Siendo sv: entropía del vapor, sl: entropía del líquido.

Cálculo de: VOLUMEN MOLAR (m <sup>3</sup> /kmol) - OCTANO				
T <sub>c</sub> = 568.6K; P <sub>c</sub> = 2.497MPa; w=0.4015				
T(K)	V <sub>v</sub> bibliografía	V <sub>v</sub> calculado	V <sub>l</sub> bibliografía	V <sub>l</sub> calculado
280	3642.980	82898.472	0.158	0.000
300	1221.940	91.691	0.162	0.157
340	200.078	79.432	0.171	0.159
380	51.162	40.101	0.181	0.162
400	28.778	28.429	0.196	0.190
420	17.701	18.368	0.192	0.196
460	7.537	7.641	0.208	0.215
500	3.540	3.481	0.230	0.246
540	1.599	1.569	0.271	0.310
560	0.914	0.949	0.321	0.397

**Tabla 13:** Propiedades del Octano calculadas y obtenidas del Manual del Ingeniero Químico de Perry y Green.

Se observa que los datos de presión de vapor calculados para Propano y para Octano son muy similares a los de bibliografía. Así mismo, la entalpía, entropía y el volumen molar calculados

nos dan valores muy cercanos a los valores de tablas de Perry y Green antes mostrados. Se utilizaron valores de referencia de bibliografía para  $T$ ,  $h$  y  $s$ , para el cálculo de  $h$  y  $s$  ideal, lo que disminuyó considerablemente los valores calculados para  $h$  y  $s$  con respecto de la primera entrega.

### **Conclusiones 1.2**

Teniendo en cuenta lo mencionado en la sección anterior, concluimos que nuestro programa logra calcular presión de saturación, diagrama  $p - v$ , entalpía y entropía molares y coeficiente de fugacidad para una sustancia pura usando la ecuación de Peng-Robinson con excelentes resultados comparados con las tablas de bibliografía de Perry y Green y comparados a su vez con el software Hysys.

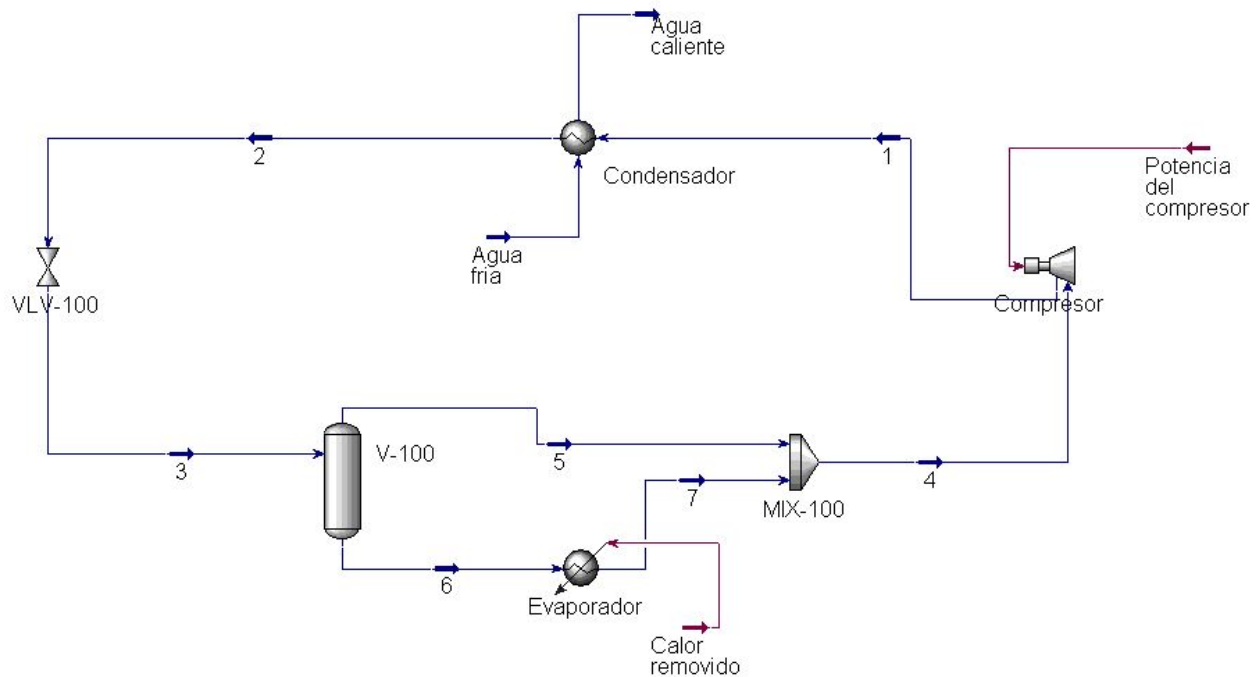
### **Introducción 1.3.**

Una de las principales áreas de aplicación de la termodinámica es la refrigeración, que es la transferencia de calor desde una región de temperatura inferior hacia otra de temperatura superior. En la práctica cotidiana, el calor fluye desde una zona de alta temperatura a una de baja temperatura sin necesidad de algún dispositivo. El proceso inverso no sucede por sí solo. Para lograrlo sin violar la segunda ley de la termodinámica se requiere de máquinas especiales conocidas como refrigeradores.

En este trabajo práctico estudiaremos uno de los posibles ciclos en los que operan los refrigeradores. Este es el ciclo de refrigeración por compresión de vapor, donde el refrigerante (Propano) se evapora y condensa alternadamente, para luego comprimirse en la fase de vapor.

**Planteo y resolución del problema 1.3.**

Para comenzar a plantear el problema, lo mejor es ver el diagrama de flujo correspondiente.

**Flowsheet 1:** Esquema del ciclo refrigerante simple.

Los datos que se tienen son: el calor removido en el evaporador, la temperatura del agua de servicio, la temperatura del Propano a la salida del condensador y en el evaporador, y por último, la eficiencia del compresor.

El programa realizado en Matlab sigue la siguiente idea:

- 1) Sabiendo la temperatura del Propano a la salida del condensador y que se trata de líquido saturado, queda determinada la presión y la entalpía en ese punto usando la ecuación de Peng-Robinson.
- 2) Sabiendo que la temperatura en el evaporador es de 270K y que allí hay líquido saturado pasando a vapor saturado, podemos calcular la presión en esa zona usando P-R. Además queda determinada la entalpía antes y después del evaporador.
- 3) Usando el dato del calor removido en el evaporador junto con la diferencia de entalpía calculada en el ítem de arriba, se puede calcular el caudal molar que pasa por el evaporador.
- 4) Sabiendo la entalpía después de la válvula (porque es igual a la calculada en el ítem 1), y también las entalpías de saturación del Propano a esa misma temperatura, se puede calcular el título.



- 5) Usando el título calculado anteriormente y el caudal que pasa por el evaporador, podemos calcular el caudal total de Propano en el ciclo refrigerante.
- 6) Por último, sólo queda hacer un balance de energía en el compresor para despejar la potencia requerida por el mismo.

Con respecto al costo de los equipos, tenemos dos intercambiadores de calor y un compresor. Dado que el compresor es el equipo ampliamente más caro, simplificaremos las cuentas y haremos el cálculo del costo de los equipos como si se tratara solamente del compresor.

Para esta parte del TP, usaremos el método descrito en “Conceptual design of chemical processes”. El costo de compra se puede estimar de forma rápida y simple mediante el uso de correlaciones, las cuales no requieren profundizar detalladamente en el diseño del equipo y son buenas primeras aproximaciones para tomar como referencia. En particular, para este trabajo utilizaremos la correlación de K. M. Guthrie:

$$\text{Costo de compra (U\$D)} = (\text{Costos base}) \times (\text{Índice}) \times (F_C) \quad (25)$$

Donde el término:

- “Costos base” es función, en el caso del compresor, de su potencia, y tiene una relación directa con la dimensión y la utilidad que se le dará, y por consiguiente sus condiciones de operación.
- “ $F_C$ ” es un factor de corrección que depende del tipo de material del equipo, así como de qué otros equipos se le acoplen para su funcionamiento, como por ejemplo motores eléctricos o turbinas de vapor.
- “Índice”, debido a que los precios se modifican constantemente al pasar los años, este término ayuda a corregir el error producido por no poder predecir el estado de los precios a futuro, y se calcula como la razón entre el índice inflacionario de Marshall y Swift (publicado mensualmente en la revista Chemical Engineering, simbolizado como M&S) actual y su correspondiente al año en el que se llevó a cabo la correlación.

Para los costos de instalación solo le agregaremos un factor de instalación ( $F_I$ ) a la ecuación de los costos de compra quedando así:

$$\text{Costo total (U\$D)} = \text{Costo de compra} + \text{Costo de instalación} \quad (26)$$

$$\text{Costo total (U\$D)} = (\text{Costos base}) \times (\text{Índice}) \times (F_C + F_I) \quad (27)$$

Para realizar el cálculo debemos primero obtener la potencia real del compresor. Una vez obtenida, se aplica la correlación de Guthrie:

$$\text{Costo total (U\$D)} = \left(\frac{M\&S}{280}\right) \times (517,5) \times (bhp)^{0,82} \times (F_C + F_I) \quad (28)$$

Donde “bhp” es la potencia extraída de nuestro software, “M&S” es el índice inflacionario de Marshall and Swift, publicado en la revista *Chemical Engineering* hasta 2012, cuyo valor usado será el correspondiente a ese mismo año (M&S = 903.6) y “F<sub>I</sub>”, el factor de instalación sugerido por la bibliografía para compresor centrífugo como 2,11.

### **Resultados y discusión 1.3.**

Lo primero que pide el ejercicio es fijar la diferencia de temperatura entre el Propano y el agua de servicio en 10 K. Luego, analizar cómo el cambio en la eficiencia del compresor afecta el COP, la producción de entropía, la potencia requerida en el compresor y el costo del ciclo.

	Rendimiento $\eta = 0,6$	Rendimiento $\eta = 0,75$	Rendimiento $\eta = 0,9$
COP	2.8756	3.5945	4.3134
Producción de entropía (kJ/[kmol*K])	4.8878	2.4766	0.8330
Potencia del compresor (kW)	3477.6	2782.0	2318.4
Costo del ciclo (U\\$D)	5.4556e+06	3.7837e+06	2.8058e+06

**Tabla 14:** Propiedades del ciclo en función del rendimiento del compresor.

En la tabla de arriba se observa que cuanto mayor sea el rendimiento del compresor, menos potencia requerirá, menos entropía generará. tendrá un mayor COP y por último, el costo del equipo será menor.

A continuación, el ejercicio pide analizar el cambio en el caudal de Propano, el COP, la potencia requerida, la producción de entropía y el costo del ciclo, a distintas diferencias de temperatura en el condensador, para una eficiencia de 75% en el compresor.

	$\Delta T = 5$	$\Delta T = 10$	$\Delta T = 20$	$\Delta T = 40$
COP	4.2274	3.5945	2.6672	1.4990
Producción de entropía (kJ/[kmol*K])	2.2642	2.4766	2.8539	3.4399
Potencia del compresor (kW)	2365.5	2782.0	3749.3	6671.0
Costo del ciclo (USD)	3.3125e+06	3.7837e+06	4.8325e+06	7.7512e+06
Caudal de Propano (kmol/s)	0.59579	0.59579	0.59579	0.59579

**Tabla 15:** Propiedades del ciclo en función de la diferencia de temperatura en el condensador.

En la tabla de arriba se observa que cuanto menor sea la diferencia de temperatura entre el agua de servicio y el Propano, mayor será el COP, menor será la generación de entropía, menor será la potencia del compresor y menor será el costo del compresor. El caudal de Propano será el mismo siempre.

### **Conclusiones 1.3.**

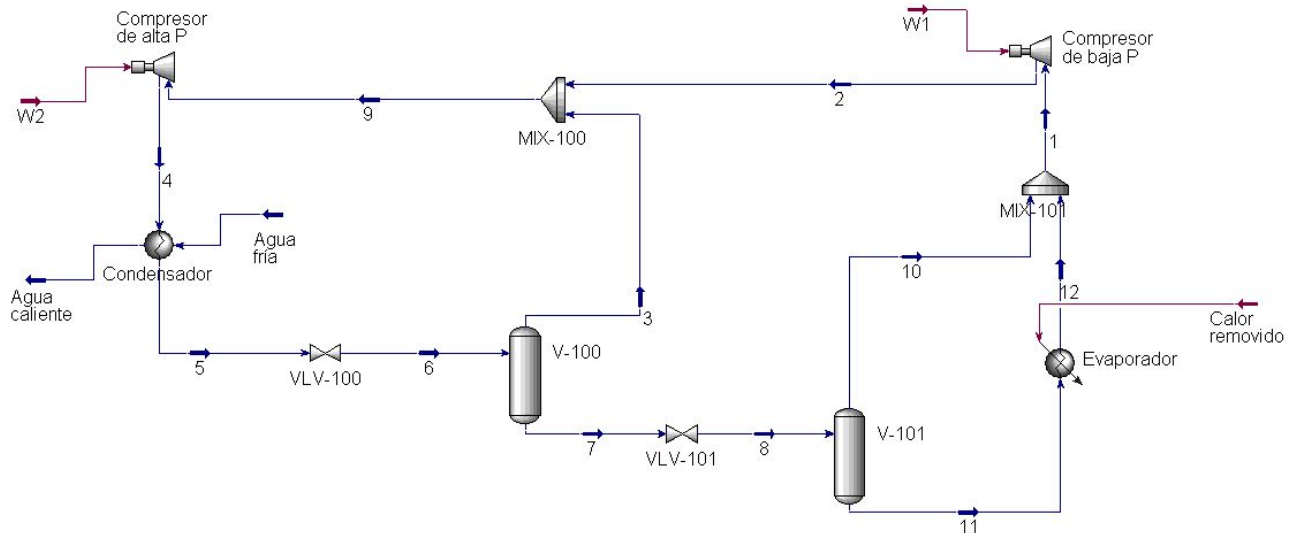
Por el análisis de los resultados, concluimos que si se quiere mejorar un ciclo frigorífico, se puede cambiar el compresor por uno más eficiente. Otra forma es reducir la diferencia de temperatura entre el agua de servicio y el refrigerante.

### **Introducción 1.4.**

Para sistemas de refrigeración por compresión de vapor, donde se desea reducir la potencia del compresor, se realizan modificaciones que consisten en incluir la compresión en dos etapas con refrigeración intermedia. De esta manera, en vez de usar un sólo compresor muy potente, se utilizan dos compresores de menor potencia. Además, al fraccionar el proceso de compresión en dos etapas, se reduce la irreversibilidad del proceso, y por consiguiente, se reduce la potencia total requerida por el ciclo.

### Planteo y resolución del problema 1.4.

Para comenzar a plantear el problema, lo mejor es ver el diagrama de flujo correspondiente:



**Flowsheet 2:** Esquema para el ciclo refrigerante con doble etapa de compresión y refrigeración intermedia.

El ciclo se puede resolver sin inconvenientes. La forma de hacerlo es análoga a la del problema anterior. La diferencia con aquel es que ahora existe una presión intermedia, pero como la debemos usar como dato de entrada, el sistema se puede resolver.

En este caso, nos interesa averiguar la presión intermedia óptima. Para ello probaremos distintas formas de estimarla.

Un primer criterio sería:

$$P_{intermedia} = \frac{P_{alta} + P_{baja}}{2} = 0,71388 \text{ MPa} \quad (29)$$

Un segundo criterio sería:

$$P_{intermedia} = \sqrt{P_{alta} * P_{baja}} = 0,65484 \text{ MPa} \quad (30)$$

Un tercer criterio podría ser:

$$P_{intermedia} = P_{alta} * 0,6 + P_{baja} * 0,4 = 0,77073 \text{ MPa} \quad (31)$$

Un cuarto criterio podría ser:

$$P_{intermedia} = P_{alta} * 0,4 + P_{baja} * 0,6 = 0,65703 \text{ MPa} \quad (32)$$

Los valores necesarios son  $P_{alta} = 0.99815 MPa$  y  $P_{baja} = 0.42961 MPa$  que corresponden a las presiones de saturación del Propano a las temperaturas del condensador y del evaporador respectivamente.

#### **Resultados y discusión 1.4.**

Al resolver el ciclo frigorífico se puede construir la siguiente tabla de resultados:

	Primer criterio $P_{intermedia} = 0.7139$ MPa	Segundo criterio $P_{intermedia} = 0.6548$ MPa	Tercer criterio $P_{intermedia} = 0.7707$ MPa	Cuarto criterio $P_{intermedia} = 0.6570$ MPa
COP	6.0128	6.0178	5.9799	6.0182
Producción de entropía en compresor de Alta (kJ/[kmol*K])	0.76690	0.96117	0.59330	0.95369
Producción de entropía en compresor de baja (kJ/[kmol*K])	1.1905	0.99925	1.3563	1.0067
Potencia del compresor (kW)	1663.1	1661.7	1672.2	1661.6
Caudal total de Propano (kmol/s)	0.75642	0.75636	0.75687	0.75636

**Tabla 16:** Propiedades del ciclo en función de las diferentes presiones intermedias.

Se observa que el segundo y cuarto criterio dan resultados similares entre sí, y mejores que los otros dos criterios. Ambos criterios estiman una presión intermedia menor que la presión media entre  $P_{alta}$  y  $P_{baja}$ .

También se observa que los COP son mayores que en el ciclo simple, las potencias son menores y el caudal total de Propano es mayor.

**Conclusiones 1.4.**

En base a los resultados obtenidos, concluimos que la presión intermedia óptima para un ciclo frigorífico de dos etapas es menor que la presión media entre  $P_{alta}$  y  $P_{baja}$ . Un buen criterio para elegir la  $P_{intermedia}$  es usar la siguiente fórmula:  $P_{intermedia} = \sqrt{P_{alta} * P_{baja}}$ .

También podemos concluir que el ciclo frigorífico multietapa es mucho más eficiente que el ciclo simple. Las desventajas son, que usa más refrigerante que el ciclo simple y que requiere de dos compresores, por lo cual habría que hacer un análisis económico de si conviene comprar dos compresores pequeños o uno sólo grande.

## **2. USO DE LA ECUACIÓN DE PENG-ROBINSON EN MEZCLAS MULTICOMPONENTES**

### **Introducción 2.1.**

Se desarrollará un software que calcule el punto de burbuja y el punto de rocío para una mezcla multicomponente utilizando la ecuación de Peng-Robinson. Además se realizará el diagrama  $T - x - y$  para la mezcla butano - pentano.

### **Planteo y resolución del problema 2.1.**

Para el caso de mezclas de compuestos se aplican reglas derivadas de aquellas de Van der Waals y que son usuales para las ecuaciones cúbicas de estado, en nuestro caso Peng-Robinson:

$$a_{mix} = \sum_{n=1}^n \sum_{n=1}^n y_i y_j a_{ij} \quad (33)$$

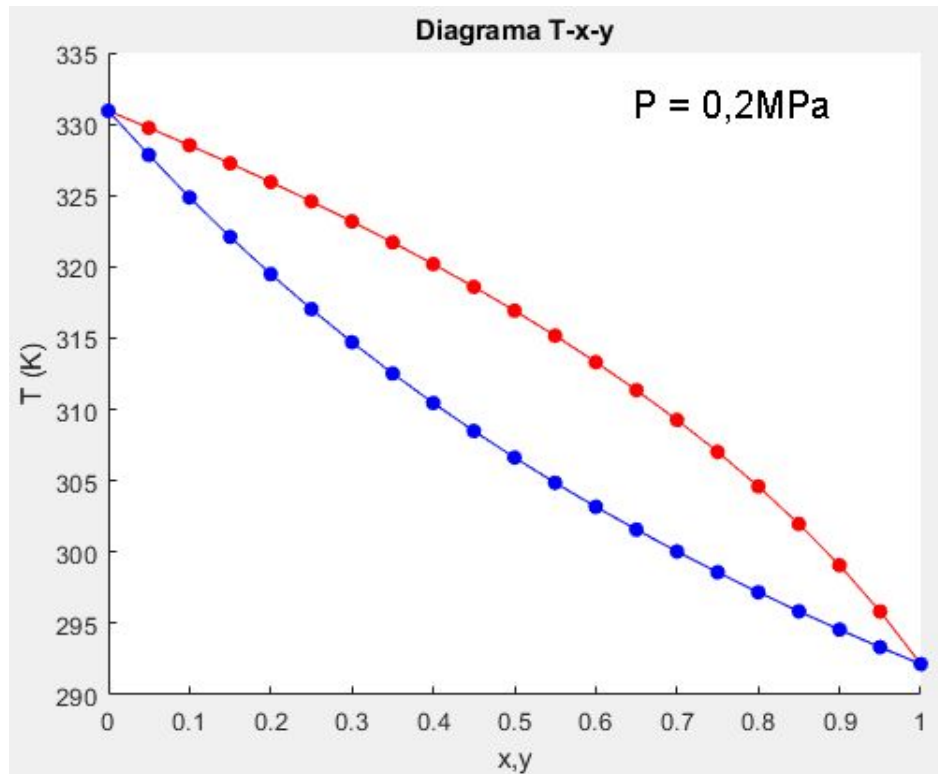
$$a_{ij} = \left( a_i a_j \right)^{0,5} \left( 1 - k_{ij} \right) \quad (34)$$

$$b_{mix} = \sum_{j=1}^n b_j y_j \quad (35)$$

### **Resultados y discusión 2.1.**

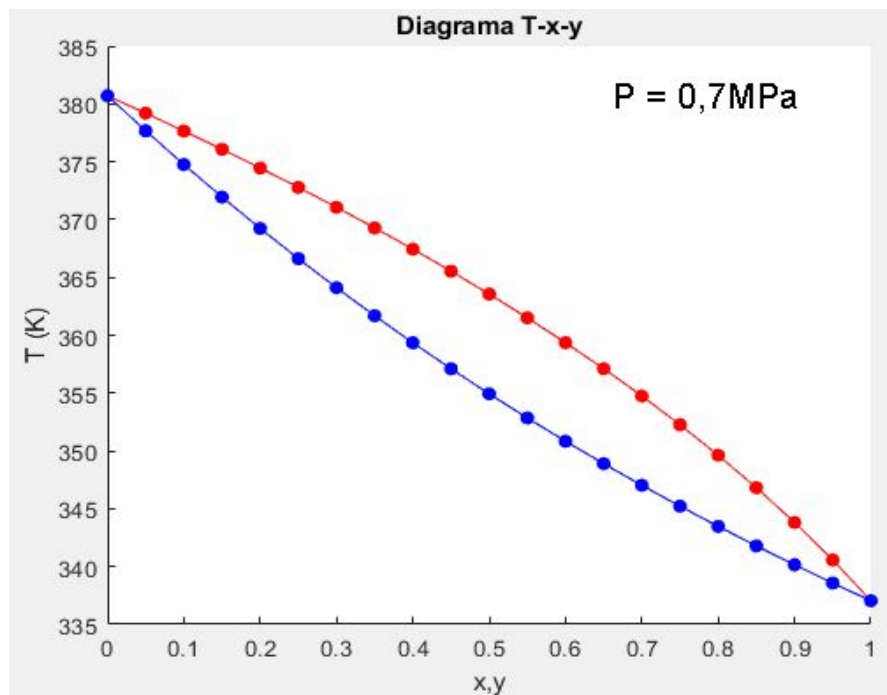
El ejercicio pide generar el diagrama T-X-Y de la mezcla Butano/Pentano para tres presiones distintas, haciendo uso del programa que calcula  $T_{\text{burbuja}}$  y  $T_{\text{rocío}}$  mediante la ecuación de Peng-Robinson multicomponente.

El primer diagrama T-X-Y de But/Pent es para una Presión de 0,2 MPa:



**Gráfico 3:** Temperatura de rocío y burbuja para el sistema Butano-Pentano a diferentes composiciones.

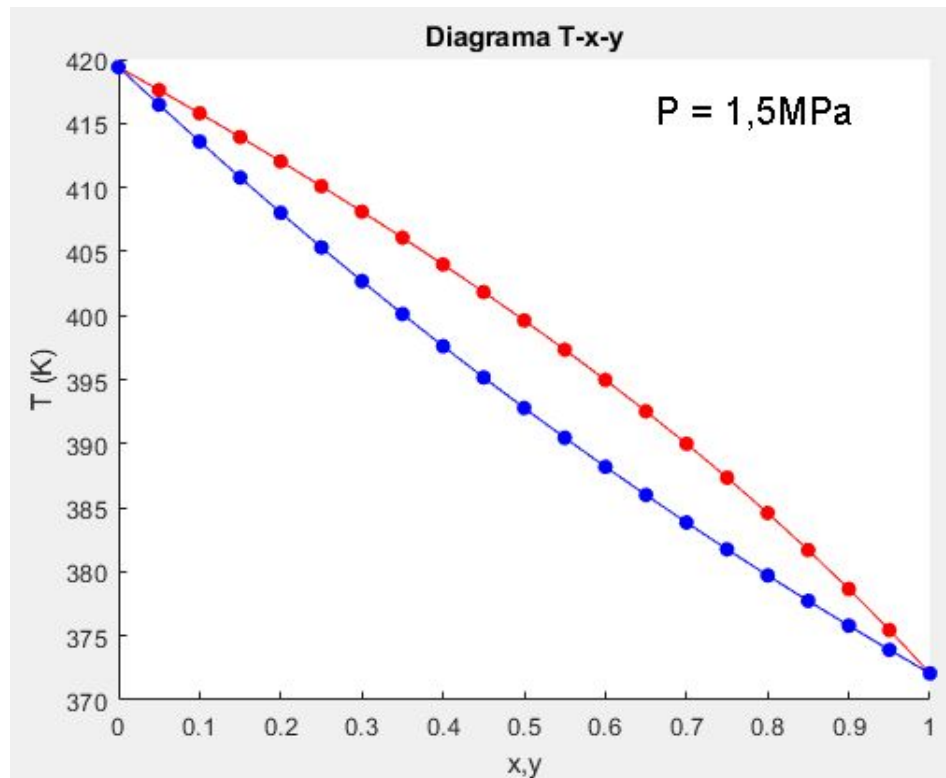
El segundo diagrama T-X-Y de But/Pent es para una Presión de 0,7 MPa:



**Gráfico 4:** Temperatura de rocío y burbuja para el sistema Butano-Pentano a diferentes composiciones.



El tercer y último diagrama T-X-Y de But/Pent es para una Presión de 1,5 MPa:



**Gráfico 5:** Temperatura de rocío y burbuja para el sistema Butano-Pentano a diferentes composiciones.

### **Conclusiones 2.1.**

La ecuación de estado de Peng-Robinson modela muy bien la mezcla Butano-Pentano.

Puede observarse como ambos compuestos al tener una estructura molecular similar y mismas interacciones intermoleculares no generan azeótropo de ningún tipo.

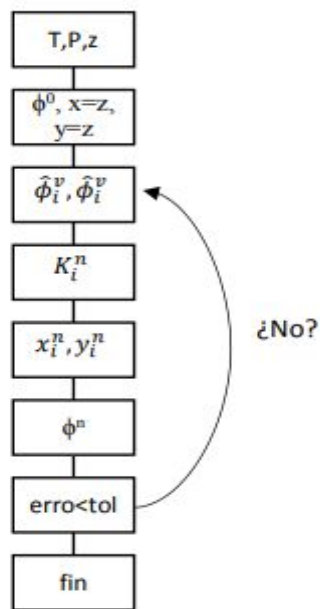
### **Introducción 2.2.**

Las ecuaciones cúbicas de estado permiten el modelado de diferentes propiedades del sistema, unas de estas propiedades son la fracción de vapor y composición de las fases en un sistema en equilibrio líquido vapor como el que se presenta en un separador flash.

Se generó un algoritmo iterativo que logró modelar estas propiedades con la ecuación de Peng-Robinson para la mezcla multicomponente de n-Butano - n-Pentano - n-Hexano.

### **Planteo y resolución del problema 2.2.**

Se siguió el siguiente diagrama de flujo



**Gráfico 6:** Esquema del flujo de ejecución de la resolución del flash.

Para el cálculo de los coeficientes de fugacidad se utilizó la ecuación de Peng-Robinson mientras que para el cálculo de la fracción de vapor se utilizaron las ecuaciones de Rachford-Rice. Para el cálculo de la raíz de la ecuación se utilizó el método de Newton-Raphson con un valor semilla de la fracción de vapor de 0.5 y una tolerancia de  $1e-05$ .

## **Resultados y discusión 2.2.**

1° Simulación:

P = 0.2 MPa / T = 340K / z = [0.4, 0.3, 0.3]		
	Programa de MATLAB	Hysys
Fracción de vapor	1	1
Xbutano	0	0
Xpentano	0	0
Xhexano	0	0
Ybutano	0.4000	0.4000
Ypentano	0.3000	0.3000
Yhexano	0.3000	0.3000

**Tabla 17:** 1° Simulación.

## 2° Simulación:

P = 0.2 MPa / T = 325K / z = [0.4, 0.3, 0.3]		
	Programa de MATLAB	Hysys
Fracción de vapor	0.4446	0.4429
Xbutano	0.2451	0.2460
Xpentano	0.3217	0.3217
Xhexano	0.4332	0.4323
Ybutano	0.5934	0.5937
Ypentano	0.2729	0.2727
Yhexano	0.1337	0.1336

**Tabla 18:** 2° Simulación.

## 3° Simulación:

P = 0.5 MPa / T = 360K / z = [0.4, 0.3, 0.3]		
	Programa de MATLAB	Hysys
Fracción de vapor	0.4543	0.4503
Xbutano	0.2692	0.2710
Xpentano	0.3162	0.3161
Xhexano	0.4146	0.4128
Ybutano	0.5571	0.5575
Ypentano	0.2806	0.2803
Yhexano	0.1623	0.1622

**Tabla 19:** 3° Simulación.

## 4° Simulación:

P = 0 MPa / T = 0K / z = [0.4, 0.3, 0.3]		
	Programa de MATLAB	Hysys
Fracción de vapor	0	0
Xbutano	0.4000	0.4000
Xpentano	0.3000	0.3000
Xhexano	0.3000	0.3000
Ybutano	0	0
Ypentano	0	0
Yhexano	0	0

**Tabla 20:** 4° Simulación.

## 5° Simulación:

P = 1 MPa / T = 400K / z = [0.4, 0.3, 0.3]		
	Programa de MATLAB	Hysys
Fracción de vapor	0.8706	0.8701
Xbutano	0.2180	0.2181
Xpentano	0.2918	0.2919
Xhexano	0.4902	0.4901
Ybutano	0.4270	0.4272
Ypentano	0.3012	0.3012
Yhexano	0.2717	0.2716

**Tabla 21:** 5° Simulación.

## 6° Simulación:

P = 1 MPa / T = 400K / z = [0.7, 0.2, 0.1]		
	Programa de MATLAB	Hysys
Fracción de vapor	1	1
Xbutano	0	0
Xpentano	0	0
Xhexano	0	0
Ybutano	0.7	0.7000
Ypentano	0.2	0.2000
Yhexano	0.1	0.1000

**Tabla 22:** 6° Simulación.

## 7° Simulación:

P = 1 MPa / T = 366K / z = [0.7, 0.2, 0.1]		
	Programa de MATLAB	Hysys
Fracción de vapor	0.1047	0.1036
Xbutano	0.6828	0.6830
Xpentano	0.2091	0.2090
Xhexano	0.1081	0.1080
Ybutano	0.8468	0.8469
Ypentano	0.1225	0.1224
Yhexano	0.0307	0.0307

**Tabla 23:** 7° Simulación.

## 8° Simulación:

P = 0.15 MPa / T = 300K / z = [0.7, 0.2, 0.1]		
	Programa de MATLAB	Hysys
Fracción de vapor	0.6363	0.6349
Xbutano	0.4922	0.4932
Xpentano	0.2926	0.2923
Xhexano	0.2152	0.2146
Ybutano	0.8188	0.8189
Ypentano	0.1470	0.1469
Yhexano	0.0342	0.0341

**Tabla 24:** 8° Simulación.

## 9° Simulación:

P = 0.15 MPa / T = 347K / z = [0.1, 0.2, 0.7]		
	Programa de MATLAB	Hysys
Fracción de vapor	0.9981	0.9959
Xbutano	0.0195	0.0196
Xpentano	0.1007	0.1010
Xhexano	0.8798	0.8794
Ybutano	0.1002	0.1003
Ypentano	0.2002	0.2004
Yhexano	0.6996	0.6993

**Tabla 25:** 9° Simulación.

## 10° Simulación:

P = 0.15 MPa / T = 348K / z = [0.1, 0.2, 0.7]		
	Programa de MATLAB	Hysys
Fracción de vapor	1	1
Xbutano	0	0
Xpentano	0	0
Xhexano	0	0
Ybutano	0.1000	0.1000
Ypentano	0.2000	0.2000
Yhexano	0.7000	0.7000

**Tabla 26:** 10° Simulación.

## 11° Simulación:

P = 0.15 MPa / T = 300K / z = [0.6, 0.3, 0.1]		
	Programa de MATLAB	Hysys
Fracción de vapor	0.4027	0.4005
Xbutano	0.4736	0.4746
Xpentano	0.3752	0.3746
Xhexano	0.1512	0.1508
Ybutano	0.7875	0.7876
Ypentano	0.1885	0.1884
Yhexano	0.0240	0.0240

**Tabla 27:** 11° Simulación.

## 12° Simulación:

P = 1.5 MPa / T = 400K / z = [0.6, 0.3, 0.1]		
	Programa de MATLAB	Hysys
Fracción de vapor	0.8206	0.8200
Xbutano	0.4514	0.4517
Xpentano	0.3650	0.3649
Xhexano	0.1835	0.1834
Ybutano	0.6324	0.6326
Ypentano	0.2857	0.2857
Yhexano	0.0817	0.0817

**Tabla 28:** 12° Simulación.

## 13° Simulación:

P = 1.45 MPa / T = 400K / z = [0.6, 0.3, 0.1]		
	Programa de MATLAB	Hysys
Fracción de vapor	0.9341	0.9336
Xbutano	0.4256	0.4259
Xpentano	0.3693	0.3693
Xhexano	0.2049	0.2048
Ybutano	0.6122	0.6124
Ypentano	0.2951	0.2951
Yhexano	0.0926	0.0926

**Tabla 29:** 13° Simulación.



## 14° Simulación:

P = 0.1 MPa / T = 283K / z = [0.6, 0.3, 0.1]		
	Programa de MATLAB	Hysys
Fracción de vapor	0.5633	0
Xbutano	0.3794	0.6000
Xpentano	0.4228	0.3000
Xhexano	0.1978	0.1000
Ybutano	0.7710	0.8721
Ypentano	0.2048	0.1169
Yhexano	0.0242	0.0110

**Tabla 30:** 14° Simulación.

## 15° Simulación:

P = 0.1 MPa / T = 300K / z = [0.6, 0.3, 0.1]		
	Programa de MATLAB	Hysys
Fracción de vapor	1	0.9269
Xbutano	0	0.2544
Xpentano	0	0.3967
Xhexano	0	0.3489
Ybutano	0.6000	0.6273
Ypentano	0.3000	0.2924
Yhexano	0.1000	0.0804

**Tabla 31:** 15° Simulación.**Conclusiones 2.2.**

El programa hecho en MatLab funciona muy bien para condiciones de P y T donde hay separación de fases. Aunque hay que mencionar que si nos acercamos a condiciones límites, el programa empieza a fallar, esto se evidencia en las simulaciones 14° y 15°.

**Referencias.**

- [1] Sandler, S.I., *Chemical, Biochemical and Engineering Thermodynamics*, 4ta edición, John Wiley & Sons, 2006.
- [2] J. M. Smith, H.C. Van Ness, M. M. Abbott, *Introducción a la termodinámica en Ingeniería Química*, Séptima edición, Mc Graw Hill.
- [3] Douglas, M. James, 1988. *Conceptual design of chemical processes*, edición internacional. Página 154.