



PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATOLICA DE CHILE

ESCUELA DE INGENIERIA

DEPTO. INGENIERIA QUIMICA Y BIOPROCESOS

IIQ 2043 FISICOQUIMICA (1'2017)

Tarea 1 (Equilibrio Líquido- Vapor)

Fecha Entrega: Viernes 28 de Abril de 2017, 23:59 hrs vía siding. Grupo

de 3 o 4 integrantes (inscripción vía siding).

Instrucciones Generales

- Competencia a Evaluar: (8) Construir e interpretar diagramas de fase para mezclas en equilibrio. Además, se evaluará *"An ability to use the techniques, skills, and modern engineering tools necessary for engineering practice"* (Student Outcome K, Acreditación ABET).
- La tarea está pensada para ser resuelta por el grupo en su conjunto y no como subdivisión de tareas.
- Se deben generar tablas y gráficos de calidad profesional, indicando claramente ejes, unidades, etc. Estos pueden realizarse en diversos programas, como por ejemplo, Excel, Matlab, etc.
- Además de la resolución de la tarea en pdf, donde se deben incluir las explicaciones y pasos seguidos, se deben adjuntar todos los archivos relevantes para la realización de los cálculos y los gráficos: códigos, planillas, etc.
- Es fundamental que los documentos antes mencionados sean de completa creación del grupo que lo entrega. En caso de duplicar archivos (usarse por dos grupos o más), o usar códigos o planillas obtenidas en otros sitios (internet o años anteriores), todos los integrantes involucrados tendrán la nota mínima en la tarea (1,0) y serán notificados a la dirección de pregrado, independiente de su participación en la falta.
- Cada sub--parte de la tarea será evaluada según:
 - Distinguido (Contesta la pregunta correctamente y los cálculos gráficos, analíticos y/o numéricos están correctos, 100% del puntaje)
 - Competente (Contesta la pregunta correctamente, pero los cálculos gráficos, analíticos y/o numéricos contienen errores menores, 75% del puntaje)
 - Intermedio (Contesta la pregunta correctamente, pero los cálculos gráficos, analíticos y/o numéricos contienen errores graves, o bien la respuesta es contestada parcialmente, 50% del puntaje)
 - En desarrollo (Contesta la pregunta parcialmente y los cálculos gráficos, analíticos y/o numéricos contienen errores graves, 25% del puntaje)
 - No logrado (No contesta la pregunta o la contesta de manera incorrecta, 0% del puntaje)

En esta tarea deberán analizar una mezcla binaria. Cada grupo debe tener una mezcla distinta a analizar. Los datos de equilibrio líquido vapor pueden obtenerse de la página <http://www.ddbst.com/en/EED/VLE/VLEindex.php> u otra similar, y los parámetros de Antoine en la página de NIST <http://webbook.nist.gov/chemistry/>. Se deben asegurar que existan datos de equilibrio para una temperatura determinada.

Inscripción grupo y mezcla:

- Cada grupo debe inscribirse en el cuestionario correspondiente del SIDING, indicando los compuestos y temperatura de la mezcla que van a analizar. Las mezclas no pueden repetirse, por lo que se realizará la asignación por orden de inscripción en el SIDING.
- Cada uno de los integrantes del grupo debe cumplir un rol: líder, secretario/a, investigador/a, programador/a, u otro, los que deben indicarlos al momento de inscribir el grupo.

- a) Calcular la presión de vapor de compuesto puro de los dos compuestos de la mezcla seleccionada, a la temperatura seleccionada, a partir de la ecuación de Antoine y las constantes reportadas en la base de datos o artículo respectivo.

$$\log_{10}(P_i^\circ) = A_i - \frac{B_i}{C_i + T}$$

- b) Realizar un diagrama de fases para la mezcla escogida en (P vs x,y), que incluya:
1. Datos experimentales presentados en el artículo.
 2. Presiones de vapor de compuestos puros calculados en (a).
 3. Curva de equilibrio de la fase líquida (P vs x), usando estos datos y las fórmulas vistas en clases.
 4. Curva de equilibrio de la fase vapor (P vs y), usando estos datos y las fórmulas vistas en clases.
 5. Identificar las zonas de fase líquida, gaseosa y mezcla líquido-vapor.
- c) Comparen ambos equilibrios fisicoquímicos (ideal de parte (b) y datos experimentales). Encuentre el Error Cuadrático Medio (ECM) de los valores supuestos por idealidad con respecto a los datos experimentales.

$$ECM = \sqrt{\frac{\sum(y_i^{exp} - y_i^{id})^2}{n}}$$

Dónde n = número de observaciones, y_i^{exp} la fracción molar experimental del componente más volátil en la fase vapor e y_i^{id} la fracción molar del componente más volátil en el gas, asumiendo mezcla ideal. Compare los resultados obtenidos en (a) y (b), relacionando su respuesta con el valor del ECM.

- d) Calcular volatilidad relativa ideal a partir de datos de presiones de vapor calculadas en (a).
- e) Realizar un diagrama de y vs x que incluya:
 1. Datos experimentales
 2. Ecuación y vs x a partir de la ecuación vista en clases y el valor de volatilidad relativa calculada en (d).
- f) Estimar volatilidad relativa en función de la concentración a partir de los datos reales y compararlos con el caso ideal.
- g) Utilizando UNISIM realice una simulación de la mezcla escogida. Para esto ocupe el workbook para realizar un análisis de sensibilidad del punto de burbuja y el punto de rocío para diferentes concentraciones de la mezcla. Con estos datos, grafique el diagrama P – x-y para la mezcla.
- h) Se quiere destilar el componente más volátil a una composición mínima de 95%, a partir de una composición de 5% de pureza del mismo.
 1. Utilizando los diagramas desarrollados anteriormente en esta tarea, plantear un sistema de destilación que permita obtener el destilado requerido, ¿en qué condiciones ocurriría dicha destilación? ¿cuantos platos teóricos se requerirían?
 2. Identificar 2 variantes al diseño propuesto en 1), considerando todos los datos presentados en la base de datos.
 3. Indicar que consideraciones se deben tener en cuenta para realizar diseñar dicho proceso. En particular, en cuanto a gasto energético, gasto de agua de refrigeración y dimensiones de equipos.
 4. Realice la simulación del problema en UNISIM. Encuentre los valores de los requerimientos energéticos. Reporte valores de performance del destilador. Análisis sus resultados en base a los valores de performance. ¿Es factible la separación a nivel industrial?