



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.

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

- 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? ¿cuántos 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 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?