UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA NACIONAL – FACULTAD REGIONAL ROSARIO
DSOySP - 2025
Estimación de propiedades fisicoquímicas – Modelado de Equipos

---

Problema 1

I. Configurar la planilla correspondiente a Peng-Robinson seleccionando **Propano** y **nButano** con los siguientes coeficientes de interacción binaria:

BIP Peng Robinson		
alpha	Propano	N-Butano
Propano	0	0.0033
N-Butano	0.0033	0

II. Calcular el valor de la entalpía para una mezcla gaseosa equimolar a 350 K y 3 bar.

III. Si a la mezcla del punto II se la somete a una evolución isoentálpica hasta 1 bar ¿Cuál es la nueva temperatura de la mezcla? (*ayuda: no se produce un cambio de fase*).

IV. Si a la mezcla del punto II se la somete a una evolución isoentrópica hasta 1 bar ¿Cuál es la nueva temperatura de la mezcla? (*ayuda: no se produce un cambio de fase*).

Problema 2

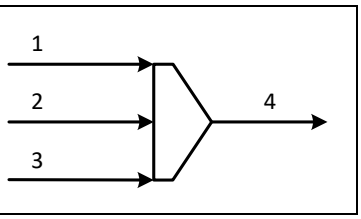
Configurar la planilla correspondiente a NRTL seleccionando **Benceno** y **Etanol** con los siguientes coeficientes de interacción binaria:

BIP NRTL						
a [cal/mol]	Benzene	Ethanol		alpha	Benzene	Ethanol
Benzene	0	1065.9086		Benzene	0	0.2937
Ethanol	516.141	0		Ethanol	0.2937	0

I. Se encontró que la temperatura de burbuja de la mezcla equimolar a 1 atm es de 339.37689 K. Calcular la composición de las fases en equilibrio.

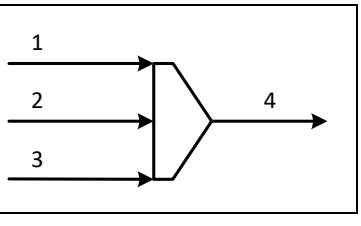
II. Dado el mezclador de la figura, completar la siguiente tabla.

#	T [K]	P [bar]	fase	*m [mol/s]*	$x_{Benzene}$
1	298.15	1.01325	liq	16	0.5
2	338	1.01325	liq	21	0.7
3	333.15	1.01325	liq	18	0.4
4			liq		



III. Dado el mezclador de la figura, completar la siguiente tabla.

#	T [K]	P [bar]	fase	*m [mol/s]*	$x_{Benzene}$
1	298.15	1.01325	liq	16	0.5
2	335	1.01325	liq	20	0.6
3		1.01325	liq	13	0.3
4	310	1.01325	liq		



Problema 3

En la Figura 1 se observa el diagrama de flujo de un ciclo frigorífico simple con una válvula de expansión y una etapa de compresión.

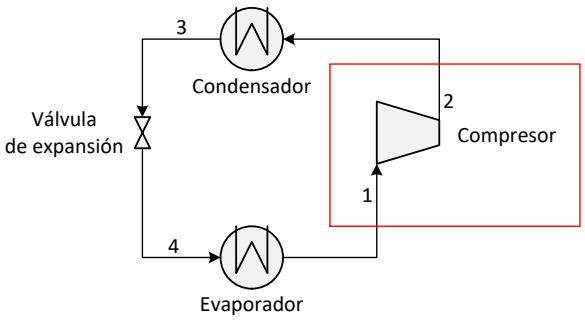


Figura 1. Diagrama de flujo

Como primera aproximación se desea implementar la resolución del compresor que se encuentra en el recuadro rojo. El fluido de trabajo seleccionado es una mezcla **Propano-nButano (0.6/0.4)** y por conveniencia se utiliza la ecuación cubica de estado de **Peng-Robinson** para el cálculo de las propiedades fisicoquímicas.

BIP Peng Robinson		
alpha	Propano	N-Butano
Propano	0	0.0033
N-Butano	0.0033	0

I. La presión de operación del evaporador es de **1.7 bar** por lo que la temperatura de la corriente 1 (salida del evaporador) corresponde a su temperatura de saturación (temperatura de rocío).

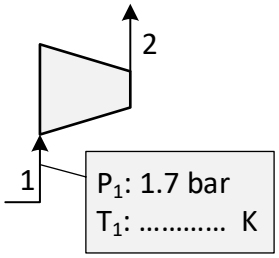


Figura 2. Condiciones de entrada al compresor

II. Una vez conocidas las condiciones de entrada al compresor se puede calcular sin problemas la salida de este. En la Figura 3 se muestran los datos necesarios para la resolución de la evolución en el compresor.

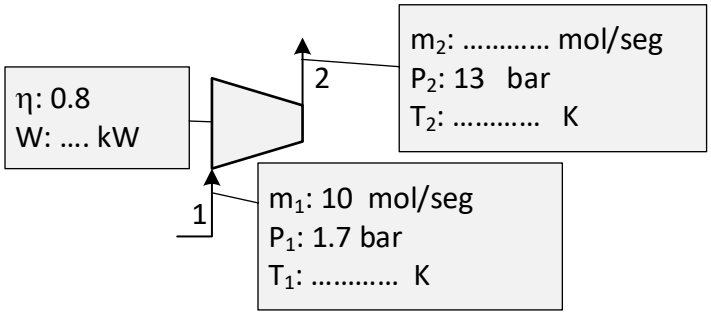


Figura 3. Modelado de un compresor (conociendo la presión de descarga)

Problema 4

Se desea enfriar 400 mol/s de Metanol desde 90ºC hasta 40ºC. Para tal efecto se usan 3100 mol/s de agua de enfriamiento disponible a 25 ºC. La presión de entrada del metanol es 5 bar y se permite una caída de presión de hasta 0.5 bar. La presión de entrada del agua es 6 bar y se permite una caída de presión de hasta 0.6 bar.

Las especificaciones de las corrientes son:

Tabla 1. Corrientes de intercambio de calor

	Entrada		**Salida**	
	Metanol	**Agua**	**Metanol**	**Agua**
Temperatura (ºC)	90	25	40	
Presión (bar)	5	6	4.5	5.4
Flujo molar (mol/s)	400	3100	400	3100

Encontrar la temperatura de salida del agua.

Problema 5

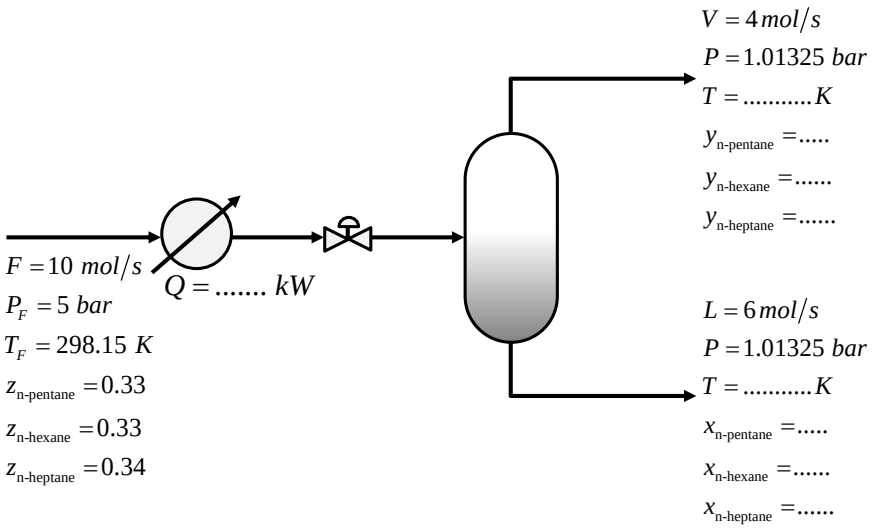


Figura 4. Equipo flash correspondiente al problema 5

La Figura 4 corresponde a un proceso flash de una mezcla de tres componentes (n-pentane, n-hexane y n-heptane).

a) A partir del modelo presentado en clase, identificar las variables definidas para cerrar los grados de libertad.
b) Proponer una secuencia de resolución asumiendo comportamiento ideal y otra asumiendo comportamiento no ideal en ambas fases.
c) Resolver para ambos casos y completar los datos faltantes.

BIP Peng-Robinson			
alpha	N-pentane	N-hexane	N-heptane
N-pentane	0	0.000393	0.001373
N-hexane	0.000393	0	0.000297
N-heptane	0.001373	0.000297	0

Problema 6

Encontrar la temperatura de rocío de una mezcla de Benceno (1) y Etanol (2) a $1.01325\ bar$ y la siguiente composición molar $x_1=0.5$ y $x_2=0.5$.

Problema 7

Graficar la curva de temperaturas de burbuja y de rocío de una mezcla de Acetona (1) y Etanol (2) a $1.0133\ bar$. Comparar el modelo ideal y no ideal con los datos experimentales (Tabla 2). ¿Qué modelo se ajusta mejor?

Tabla 2. Datos de equilibrio L-V

T	x_1	y_1
351.45	0	0
349.55	0.033	0.111
347.15	0.078	0.216
343.95	0.149	0.345
342.25	0.195	0.41
338.75	0.316	0.534
336.55	0.414	0.614
334.45	0.532	0.697
332.15	0.691	0.796
330.45	0.852	0.896
329.25	1	1

(*) Amer H.H.; Paxton R.R.; van Winkle M.: Vapor-liquid equilibria. Ind.Eng.Chem. 48 (1956) 142-146

BIP NRTL						
a [cal/mol]	Acetone	Ethanol		alpha	Acetone	Ethanol
Acetone	0	36.2965		Acetone	0	0.2987
Ethanol	434.8228	0		Ethanol	0.2987	0

Problemas Opcionales

Opcional 1

Suponer que al compresor del **Problema 3** se lo alimenta con una potencia 10% mayor que la obtenida en el caso 3-II. ¿Cuál es la nueva presión de descarga?

Opcional 2

En un reactor mezcla completa (CSTR) ocurre la siguiente reacción química en fase líquida:

$$n-C_4H_{10} \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} i-C_4H_{10}$$

$$r_{R1}\left[\frac{mol}{seg.m^3}\right]=k_1 C_{nC4} \quad k_1=2.94\times10^7\frac{1}{seg}e^{-\frac{65300}{8.314T}} \qquad r_{R2}\left[\frac{mol}{seg.m^3}\right]=k_2 C_{iC4} \quad k_2=1.176\times10^8\frac{1}{seg}e^{-\frac{72200}{8.314T}}$$

Utilizando Peng-Robinson, encontrar la condición de salida para el escenario propuesto en la Figura 5.

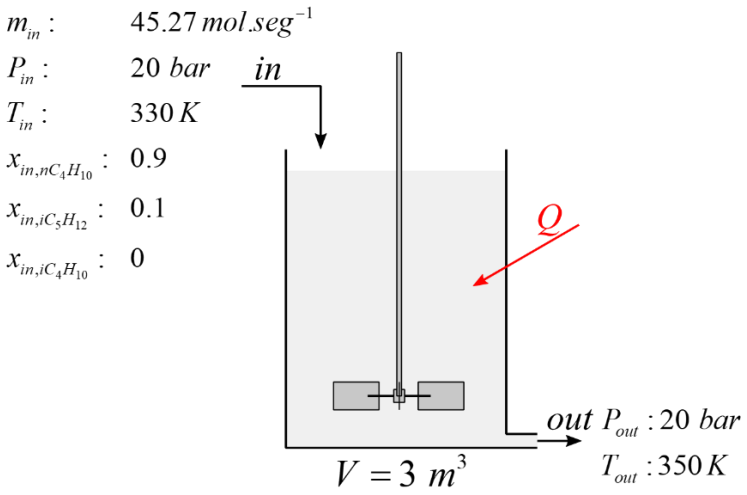


Figura 5. Reactor CSTR

BIP Peng-Robinson			
alpha	N-butane	Isopentane	Isobutane
N-butane	0	0.0015	-0.0004
Isopentane	0.0015	0	0.00107
Isobutane	-0.0004	0.00107	0

Opcional 3

Dado el reactor anterior, encontrar la condición de salida para una evolución adiabática del equipo. *Ayuda: La temperatura deja de ser un dato y el calor intercambiado debe ser Q=0.*

Opcional 4

La corriente 1 proveniente de una caldera de generación de vapor (agua pura) ingresa a la turbina para generar energía. Calcular las incógnitas del escenario presentado en la Figura 5.

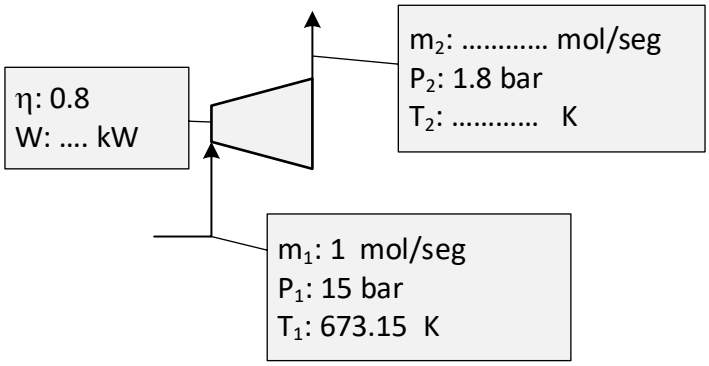


Figura 5. Turbina de vapor (I)

Opcional 5

Analizar el segundo escenario propuesto en la Figura 6. Se desea conocer la presión de descarga para lograr que la fracción vaporizada sea mayor al 99% (las gotas de líquido perjudican los alabes de la turbina).

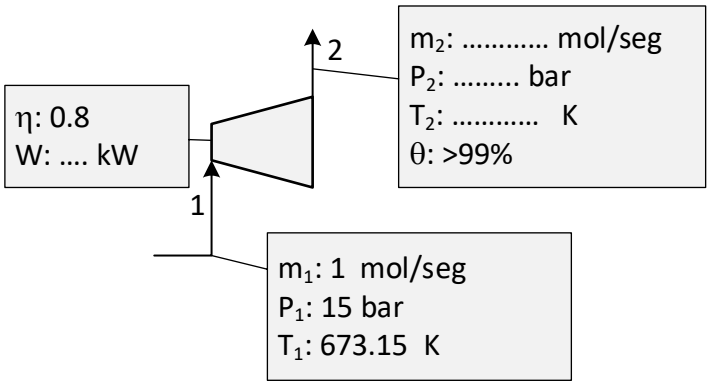


Figura 6. Turbina de vapor (II)

Opcional 6

La mezcla del **Problema 6** (a presión atmosférica) forma un azeótropo de mínimo punto de ebullición. Encontrar la composición y temperatura de saturación de este.

Opcional 7

Se desea enfriar 400 mol/s de Metanol desde 90ºC hasta 40ºC. Para tal efecto se dispone de agua de enfriamiento a 25 ºC que puede calentarse solo hasta 38 ºC. La presión de entrada del metanol es 5 bar y se permite una caída de presión de hasta 0.5 bar. La presión de entrada del agua es 6 bar y se permite una caída de presión de hasta 0.6 bar.

Las especificaciones de las corrientes son:

Tabla 3. Corrientes de intercambio de calor

	Entrada		**Salida**	
	Metanol	**Agua**	**Metanol**	**Agua**
Temperatura (ºC)	90	25	40	38
Presión (bar)	5	6	4.5	5.4
Flujo molar (mol/s)	400		400	

Encontrar el flujo molar de agua necesario.

Opcional 8

Resolver el diagrama de flujo de la figura 1 despreciando la caída de presión en los equipos de intercambio de calor, asumir condensación y evaporación total en el condensador y evaporador respectivamente. Encontrar el flujo molar necesario para un intercambio de 200 kW en el evaporador.

Opcional 9

En la Figura 7 se observa un proceso de licuefacción de gas natural en tres etapas. La corriente principal de gas natural (GN) se enfría mediante un ciclo de refrigeración que en el presente practico obviaremos su simulación.

$$\begin{pmatrix} 132 & kmol/h \\ N_2 & 0.9\% \\ CH_4 & 94\% \\ C_2H_6 & 3.1\% \\ C_3H_8 & 1.3\% \\ nC_4H_{10} & 0.4\% \\ iC_4H_{10} & 0.3\% \end{pmatrix}$$

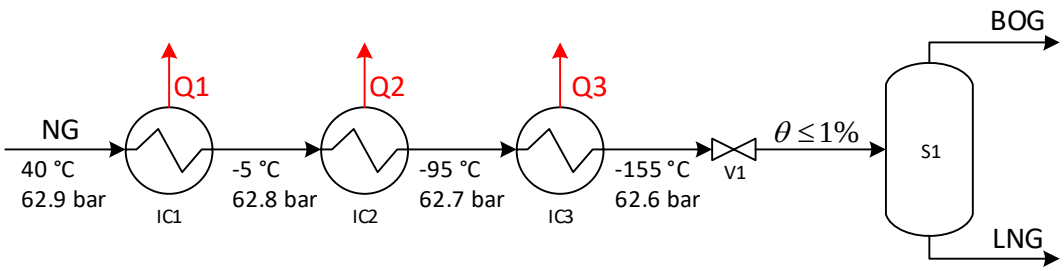


Figura 7. Proceso de licuefacción de gas natural

- Calcular la energía que se debe extraer en cada intercambiador de calor.
- Encontrar la presión hasta la que se debe expandir la válvula V1 para no superar una fracción vaporizada del 1%.
- Detallar las condiciones finales del gas natural licuado (LNG) y del Boil-off gas (BOG).

Ayuda: En el primer intercambiador ambas corrientes de gas natural están en estado vapor y en el segundo intercambiador el gas natural pasa a estado líquido completamente.

BIP Peng-Robinson						
alpha	Nitrogen	Methane	Ethane	Propane	N-butane	Isobutane
Nitrogen	0	0.0289	0.0344	0.0878	0.0711	0.1033
Methane	0.0289	0	-0.0033	0.0119	0.0244	0.0256
Ethane	0.0344	-0.0033	0	0.0011	0.0089	-0.0067
Propane	0.0878	0.0119	0.0011	0	0.0033	-0.0078
N-butane	0.0711	0.0244	0.0089	0.0033	0	-0.0004
Isobutane	0.1033	0.0256	-0.0067	-0.0078	-0.0004	0

Opcional 10

En la tabla 4 se presenta la cromatografía del gas de pozo de un yacimiento.

Tabla 4. Cromatografía de un gas de pozo

Temperatura	18 °C
Presión	4 kgf/cm^2
Compuesto	Fracción molar
NITROGENO	0.009592
DIOXIDO DE CARBONO	0.004981
METANO	0.926956
ETANO	0.032313
PROPANO	0.015164
I-BUTANO	0.003027
N-BUTANO	0.005061
I-PENTANO	0.001463
N-PENTANO	0.001443

Debido a que las cromatografías se realizan en base seca, para estimar la composición de agua de la muestra original se asume que es la suficiente para llegar a estar como vapor saturado a la presión y temperatura de la mezcla. **Encontrar la composición la mezcla incluyendo el agua.**

BIP Peng Robinson										
alpha	Nitrogen	Carbon dioxide	Methane	Ethane	Propane	Isobutane	N-butane	Isopentane	N-pentane	Water
Nitrogen	0	-0.0222	0.0289	0.0344	0.0878	0.1033	0.0711	0.0922	0.1	0
Carbon dioxide	-0.0222	0	0.0793	0.1326	0.1315	0.13	0.1352	0.1219	-0.01	0.0063
Methane	0.0289	0.0793	0	-0.0033	0.0119	0.0256	0.0244	-0.0056	0.023	0
Ethane	0.0344	0.1326	-0.0033	0	0.0011	-0.0067	0.0089	0	0.0078	0
Propane	0.0878	0.1315	0.0119	0.0011	0	-0.0078	0.0033	0.0111	0.0267	0
Isobutane	0.1033	0.13	0.0256	-0.0067	-0.0078	0	-0.0004	0	0	0
N-butane	0.0711	0.1352	0.0244	0.0089	0.0033	-0.0004	0	0	0.0174	0
Isopentane	0.0922	0.1219	-0.0056	0	0.0111	0	0	0	0	0
N-pentane	0.1	-0.01	0.023	0.0078	0.0267	0	0.0174	0	0	0
Water	0	0.0063	0	0	0	0	0	0	0	0

<u>Recomendaciones generales:</u>

Recomendamos utilizar las funciones termodinámicas para Excel desarrolladas por la catedra.

Cuando se trate de un compuesto puro, recordar que su fracción molar es igual a uno.

Se puede utilizar el Solver de Excel o proponer alguna estrategia de resolución.