

**DESARROLLO DE UN SOFTWARE PARA LA DETERMINACIÓN DE LAS
PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DE HIDROCARBUROS LIVIANOS A
PARTIR DE LA ECUACIÓN DE ESTADO DE KENNETH E. STARLING**

LUIS GABRIEL SÁNCHEZ GALVIS

COD: 2001101000

JUAN CARLOS VARGAS COY

COD: 2001102699

UNIVERSIDAD SURCOLOMBIANA

FACULTAD DE INGENIERÍA

INGENIERÍA DE PETRÓLEOS

NEIVA

2010

**DESARROLLO DE UN SOFTWARE PARA LA DETERMINACIÓN DE LAS
PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DE HIDROCARBUROS LIVIANOS A
PARTIR DE LA ECUACIÓN DE ESTADO DE KENNETH E. STARLING**

LUIS GABRIEL SÁNCHEZ GALVIS

COD. 2001101000

JUAN CARLOS VARGAS COY

COD. 2001102699

**Proyecto presentado para optar por el Grado
De Ingeniero de Petróleos**

Director:

Ing. Guiber Olaya Marín

Profesor del programa de Ingeniería de Petróleos

**UNIVERSIDAD SURCOLOMBIANA
FACULTAD DE INGENIERÍA
PROGRAMA DE INGENIERÍA DE PETRÓLEOS
NEIVA
2010**

Nota de aceptación

Firma del presidente del
jurado

Firma del jurado

Firma del jurado

DEDICATORIA

A mi Dios todo poderoso por bendecirme con este éxito tan importante para mi vida, por darme una familia tan maravillosa que me apoyó a pesar de las dificultades y que siempre estuvieron conmigo brindándome todo lo que tenían, creyeron en mí y hoy tengo que decirles con orgullo que no los defraudé; mi madre María del Pilar Galvis y mi padre Aldemar Valenzuela son los grandes artífices de este logro, solo palabras de afecto y profundo agradecimiento hacia ellos me queda, como muestra del gran amor que les tengo.

A mis hermanos Juan Manuel y Camilo Q.E.P.D desde el cielo celebran este momento; me acompañaron y me alentaron en todo instante. Hermanos este triunfo es para ustedes, gracias, los quiero mucho y los extraño demasiado.

A mis familiares encabezados por mi tío Yesid, mi abuela Marina, mi abuelo Jorge Q.E.P., Don Antonio Osorio y demás que me ayudaron cuando así lo necesité.

A mis maestros: Guiber Olaya, Carmen Pinzón, Ricardo Parra y Ervin Aranda por su gran talento para enseñar, compartir sus experiencias y conocimientos conmigo, por la paciencia y por el gran aporte a mi formación profesional. Profesor Guiber mil y mil gracias.

A todas las personas que de una u otra manera aportaron a la realización de este proyecto, manos invisibles y desinteresadas que fueron de gran ayuda, que el Señor les bendiga.

Luis Gabriel Sánchez Galvis

DEDICATORIA

A nuestro señor todo poderoso quien me guió, no me dejó desfallecer a pesar de las adversidades, a mi madre María Consuelo y esposo Benigno Ortiz quienes me apoyaron siempre, a mis tías Martha Lucía y en especial a Mary Isabel por la inmensa colaboración que me brindó desde el principio de mi carrera, dándome afecto y acogiéndome como un hijo, sin esperar nada a cambio.

A mis hermanos y familiares quienes me apoyaron en los momentos más difíciles dándome entusiasmo y ánimo.

A mi abuelo Luis Enrique Vargas Q.E.P.D desde el cielo se enorgullece; quien fue mi pilar, la persona de la cual aprendí tantos valores, tantas enseñanzas que día a día las practico; el padre que me enseñó que “ la vida es un largo camino que cada quien decide como caminarlo”.

A mis maestros: Carmen Pinzón, Ricardo Parra y Ervin Aranda personas llenas de muchos valores y virtudes que se esmeran cada día por sacar excelentes profesionales. Y de una forma muy especial al Profesor Guiber Olaya Marín por la paciencia, su aporte profesional y la dedicación que nos brindó incondicionalmente.

A las personas que de una u otra forma aportaron su grano de arena al desarrollo de este proyecto, que Dios los bendiga.

Juan Carlos Vargas Coy

AGRADECIMIENTOS

Los autores expresan sus agradecimientos a:

La Universidad Surcolombiana y especialmente al cuerpo de docentes del programa de ingeniería de petróleos, por sus enseñanzas durante toda la carrera profesional.

A Guiber Olaya Marín, Ingeniero de petróleos, director del proyecto, por su apoyo, paciencia, su valiosa y constante colaboración en la elaboración del proyecto y sus múltiples enseñanzas.

A los profesores: Carmen Pinzón, Alfonso Ortiz, Armando Castro y Ricardo Parra por su entrega incondicional, por sus consejos y aportes.

Edwin Pulgarín y Oscar Pachón, por su desinteresada colaboración.

Todas aquellas personas que de una u otra manera contribuyeron al desarrollo de este proyecto.

CONTENIDO

RESUMEN

1. OBJETIVOS	13
1.1 OBJETIVOS GENERAL	13
1.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS	14
2. JUSTIFICACIÓN	15
2.1 JUSTIFICACIÓN TEÓRICA	15
2.2 JUSTIFICACIÓN METODOLÓGICA	16
2.3 JUSTIFICACIÓN PRÁCTICA	16
3. MARCO TEÓRICO	17
3.1 ANTECEDENTES HISTÓRICOS Y ESTADO DEL ARTE DE LAS ECUACIONES TERMODINÁMICAS	17
3.1.1 Ecuaciones de Estado (EOS)	18
3.1.2 Ecuación de gas ideal	19
3.1.3 Ecuaciones cúbicas	19
3.1.4 Ecuación de van der Waals	20
3.1.5 Ecuación de Redlich Kwong	21
3.1.6 Ecuación de Soave Redlich Kwong	24
3.1.7 Ecuación de Peng Robinson	26

4. LA TERMODINÁMICA	28
4.1 LA LEY CERO	28
4.2 LA PRIMERA LEY	29
4.3 LA SEGUNDA LEY	29
4.4 LA ENTROPÍA	30
4.5 ENERGÍA INTERNA	30
4.6 ENERGÍA INTERNA DE UN GAS IDEAL	31
4.7 ENTALPÍA	33
4.8 RELACIONES GENERALES DE du , dh , ds , cv , y cp	34
4.8.1 Cambios de energía interna	34
4.8.2 Cambios de entalpía	36
4.8.3 Cambios de entropía	38
4.9 PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DE LOS FLUIDOS EN SISTEMAS DE PETRÓLEOS LIVIANOS	39
4.10 CORRELACIÓN GENERALIZADA Y PREDICCIÓN DE LAS PROPIEDADES DE LA MEZCLA	45
5. ALGORITMO	51
5.1 CÁLCULO DE PROPIEDADES PARA COMPONENTES PUROS	52
5.1.1 Cálculo de densidad molar y volumen específico	52
5.1.2 Cálculo de entalpía.	53
5.1.3 Cálculo de energía interna	55
5.1.4 Cálculo de entropía.	55
5.1.5 Cálculo de fugacidad.	56
5.2 CÁLCULO DE MEZCLAS.	57
5.2.1 Cálculo de densidad molar y volumen específico	58
5.2.2 Cálculo de entalpía.	59
5.2.3 Cálculo de energía interna	60
5.2.4 Cálculo de entropía.	60
5.2.5 Cálculo de fugacidad.	61

6. CONCLUSIONES	63
7. RECOMENDACIONES	64
8. VALIDACIÓN DE DATOS	65

BIBLIOGRAFÍA

ANEXOS

ANEXO A: TABLAS

ANEXO B: MANUAL DE USUARIO

LISTA DE TABLAS

ANEXO A

Tabla 1. Valores para los parámetros de iteración K_{ij} para usar en la correlación generalizada ($K_{ij} \times 100$)

Tabla 2. Los valores de parámetros A_j , y B_j para el uso con la ecuación de estado generalizada

Tabla 3. Propiedades físicas de las sustancias puras usadas en la ecuación de estado generalizada

Tabla 4. Parámetros de la ecuación generalizada para cada componente.

Tabla 5. Peso molecular del componente

Tabla 6. Entalpía de formación a 0 R y 0 PSI

Tabla 7. Parámetros para calcular entalpía y entropía en el estado de gas ideal.

RESUMEN

Es indiscutible la importancia de la termodinámica en la industria petrolera y petroquímica, su aplicabilidad en el diseño y optimización de facilidades de producción, refinería, transporte, a través de las propiedades termodinámicas de hidrocarburos livianos, hace interesante la obtención de estos datos de una manera fácil, precisa y en un ambiente amigable; ésto lo proporciona la herramienta de cómputo desarrollada tomando como base la ecuación de estado de Kenneth E. Starling, determina volumen específico, densidad molar, entalpía, entropía, energía interna y fugacidad de hidrocarburos livianos desde el metano hasta el octano y otros gases como el propileno, nitrógeno, dióxido de carbono y sulfuro de hidrógeno, como también la mezcla entre los componentes antes mencionados con solo ingresar la presión y/o temperatura de interés.

Isobaras, isotermas y la región de saturación hacen parte de la información que suministra el programa mediante tablas, las cuales se pueden exportar a Excel. Las gráficas permiten visualizar el comportamiento de las propiedades como también las envolventes donde coexisten la fase líquida y vapor de los componentes puros.

ABSTRACT

It is unquestionable the importance of thermodynamics in the petroleum and petrochemical industry, its applicability in the design and optimization of production facilities, refining, transportation and other through the thermodynamic properties of light hydrocarbons is interesting to obtain these data from a easily, accurately and in a friendly atmosphere, this is provided by the developed computational tool based on the equation of state Kenneth E. Starling, determines specific volume, molar density, enthalpy, entropy, internal energy and fugacity of light hydrocarbons from methane to octane, and other gases such as propylene, nitrogen, carbon dioxide and hydrogen sulfide, as well as the mix of components entering just above the pressure and / or temperature of interest.

Isobars, isotherms and saturation region are part of the information provided by the program using tables, which can be exported to Excel. The graphs allow me to visualize the behavior of the properties as well as the enclosures where coexisting liquid and vapor phase of the pure components.

1. OBJETIVOS

1.1 GENERAL

- Desarrollar una herramienta de cómputo para determinar las propiedades termodinámicas de hidrocarburos livianos basados en la ecuación de estado propuesta por Kenneth E. Starling.

1.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS:

- Elaborar un estado del arte sobre las ecuaciones de estado, propiedades termodinámicas de hidrocarburos livianos y mezclas.
- Determinar las propiedades termodinámicas de hidrocarburos livianos y mezclas mediante la herramienta de cómputo desarrollada con el programa de Visual Basic, buscando una forma fácil, amena donde el consultante se apoye de criterios de selección para componentes puros y mezclas de hidrocarburos ligeros.
- Graficar las propiedades termodinámicas de hidrocarburos livianos, que permitan una interpretación y ayuda en la toma de decisiones de cada una de las variables contempladas en el programa para visualizar mejor los procesos que conllevan a la determinación de estas propiedades.
- Comprobar los datos obtenidos en el software con datos reales, para verificar la veracidad y aproximación de los mismos.

- Se implementará un manual del usuario donde éste aprenda a desarrollar paso a paso de forma fácil los criterios de selección tanto para componentes puros como para mezclas de hidrocarburos ligeros.

2. JUSTIFICACIÓN

El desarrollo de este programa nace de la necesidad de encontrar de forma clara y precisa los datos que estaban consignados en un lenguaje de programación que basaba su aplicación en tablas, dando ahora un enfoque diferente donde el consultante no solo puede apreciar estas tablas sino que de forma práctica y sistemática se juega con las propiedades dando una mejor integración de los resultados obtenidos de entalpías, entropías, y fugacidades exportado datos de Visual a Excel, apoyados con gráficas que muestran las tendencias de cada una de las propiedades.

2.1 JUSTIFICACIÓN TEÓRICA

El diseño de equipos, y procesos utilizados en la industria petrolera y petroquímica requiere de datos termodinámicos. Estos datos son entregados por las ecuaciones de estados y se pueden aplicar al diseño de muchos tipos de equipos, como por ejemplo: para determinar el volumen de un fluido a cierta temperatura y presión para el diseño de recipientes; predecir con alta precisión entalpías para así optimizar el diseño de intercambiadores de calor; determinar datos de equilibrios vapor/líquido de los fluidos para los procesos de separación; predicción precisa de la densidad de líquidos para conocer la masa o volumen y calcular el calor total; determinar la potencia requerida en los compresores y generalmente para el diseño de rehervidores, condensadores, bombas y expandidores. En los procesos de separación, como la destilación, para el diseño de equipos se requiere de datos de equilibrios líquido/vapor. Estos datos pueden ser obtenidos por correlaciones gráficas o analíticas. Ambas utilizan datos de presión, volumen y temperatura, los cuales son proporcionados por las ecuaciones de estado.

2.2 JUSTIFICACIÓN METODOLÓGICA

Hasta la fecha es poco o nada conocida en el medio investigativo la ecuación de estado propuesta por Kenneth E. Starling, para la obtención de las propiedades termodinámicas de hidrocarburos livianos, probablemente por el gran número de parámetros que hacen parte de la misma, la importancia de este estudio radica en darla a conocer y proporcionar una herramienta de cómputo que bajo un ambiente amigable facilite datos de las propiedades termodinámicas de hidrocarburos livianos y mezclas.

2.3 JUSTIFICACIÓN PRÁCTICA

El inconveniente que presentan las ecuaciones de estado es la complejidad y el gran número de cálculos que se deben realizar para obtener un resultado, esta tarea manualmente sería casi imposible de realizar; por tal razón la forma más viable y óptima de realizar cálculos usando la ecuación de estado para obtener las propiedades termodinámicas es usando un computador con un software especializado para tal fin.

El desarrollo del software permitirá obtener información confiable, que contribuye al mejoramiento de los diseños y procesos que involucren hidrocarburos livianos.

3. MARCO TEÓRICO

El desarrollo de este trabajo necesita de la explicación de conceptos aplicados para que el consultante tenga buenas bases, donde aclare dudas y pueda ejercer mayor dominio de forma rápida y ordenada en cada una de las propiedades, dando especial atención a el estado del arte de las ecuaciones termodinámicas y conceptos fundamentales como termodinámica, entropía y entalpía, energía interna, parámetros que para muchos no son bien conocidos.

3.1 ANTECEDENTES HISTÓRICOS Y ESTADO DEL ARTE DE LAS ECUACIONES TERMODINÁMICAS

El modelamiento de equipos y procesos en la industria ha tenido un avance significativo gracias a las ecuaciones de estado (EOS), con el fin de aplicarlas en ingeniería como parte fundamental a los procesos que buscan generar mayor eficiencia en el menor tiempo posible.

Teniendo en cuenta lo anterior y partiendo de la simulación dinámica de procesos se va a hacer una breve descripción de la evolución que han sufrido estas ecuaciones, y que hoy son el punto de partida para realizar los procesos industriales.

A mediados del siglo XX aparecieron los primeros computadores análogos, con la llegada de éstos se empezó a trabajar en procesos simulados de destilación, reactores químicos e intercambiadores de calor, sin embargo éstos procesos eran lentos, consumían gran cantidad de tiempo, y costos operacionales, aun así las

empresas petroquímicas invirtieron dinero en equipos y capacitación para realizar simulaciones dinámicas de procesos ya que éstas le proporcionaban mayor eficiencia en las operaciones y procesos.

A partir de 1965 con la llegada de los computadores digitales se eliminaron las limitantes debidas al tamaño de los mismos, se simplificó la programación, se posibilitó la simulación de sistemas con cientos de ecuaciones de todo tipo y se desarrollaron nuevos métodos numéricos capaces de resolver satisfactoriamente las ecuaciones algebraico-diferenciales planteadas en los modelos.

Entre 1970 y 1995 comenzaron a surgir simuladores comerciales que podían describir el comportamiento de procesos químicos en estado estacionario, y a finales del siglo XX la velocidad de procesamiento de los computadores se hizo mucho más rápida y eficiente.

La industria del petróleo fue pionera en implantar esta medición dinámica, en el control de flujo, como medida para asegurar el flujo continuo de sus productos, buscando exactitud y calidad en el desarrollo de los procesos que involucran la extracción, almacenamiento y procesamiento del petróleo, más aun cuando de él se pueden sacar más de 3000 derivados que corresponden a un 90% de lo que se usa y consume hoy día.

3.1.1 ECUACIONES DE ESTADO (EOS)

Son expresiones analíticas que relacionan variables como temperatura, presión y volumen, entre estas se destacan las ecuaciones viriales, ecuaciones cúbicas, Carnahan-Starling, BWRS entre otras; estas poseen una estructura matemática, son de naturaleza empírica, asociada a propiedades críticas de componentes puros y mezclas.

3.1.2 ECUACIÓN DE ESTADO DEL GAS IDEAL

Esta ecuación forjó las bases de las ecuaciones que hoy día se están utilizando, entre sus características principales está que desprecia el volumen de las moléculas con relación al volumen del recipiente que las contiene, de igual forma se desprecia la interacción intermolecular. Como se muestra en la siguiente ecuación:

$$PV = nRT \quad (3.1)$$

Donde:

P = presión [psi]

V= volumen [cu ft]

n= número de moles [lbmol]

R= constante universal de los gases [10,73 psi*cu ft/lbmol*R]

T= Temperatura [R]

Esta ecuación se puede aplicar para gases reales adicionando el factor de compresibilidad de los gases (Z), Este contiene parámetros a y b, que son correcciones por atracción y volumen.

3.1.3 ECUACIONES CÚBICAS

Son ecuaciones que involucran pocos parámetros (3) se pueden realizar cálculos de manera sencilla asociada a equilibrio de fases, su solución puede ser analítica en la que alguno de los parámetros debe estar elevado al cubo en la mayoría de los casos es el volumen molar.

3.1.4 ECUACIÓN DE VAN DER WAALS (1873)

A mediados de 1873 aparece la ecuación de van der Waals contribuyendo al estudio del comportamiento PVT de las sustancias, y mejorando las predicciones de propiedades volumétricas y termodinámicas, como se observa en la ecuación general la cual relaciona temperatura y unas constantes

$$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a}{v^2} \quad (3.2)$$

Los valores de a y b se obtienen analizando el comportamiento de las isothermas en un diagrama presión - volumen (P-V).

La primera modificación que se le hizo a esta ecuación vino del señor Clausius Clapeyron quien considero que a bajas temperaturas las moléculas no se mueven libremente por efecto de que pierden energía cinética, por tal motivo Clausius introdujo la temperatura al parámetro (a) por consiguiente el factor de compresibilidad deja de ser constante generando ecuaciones de tres parámetros como se aprecia a continuación:

$$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a(T)}{(v + c)^2} \quad (3.3)$$

3.1.5 ECUACIÓN DE REDLICH-KWONG (1949)

Fue la primera ecuación de estado utilizada para aplicaciones industriales en el cálculo de propiedades termodinámicas de la *fase gaseosa* (factores Z, entalpías, coeficientes de fugacidad, etc.). Esta ecuación funciona mejor si el cociente entre la presión y presión crítica es menor que la mitad del cociente entre la temperatura y temperatura crítica.

Aunque es mejor que la ecuación de van der Waals, ésta no da buenos resultados en la fase líquida y no es recomendable su uso para el equilibrio líquido vapor.

La modificación realizada por Redlich Kwong fue considerar el efecto de la temperatura (T) en el componente de atracción (a/V^2):

$$\left(P + \frac{a'}{T^{0.5}V(V+b)} \right) (V-b) = RT \quad (3.4)$$

Despejando P:

$$P = \frac{RT}{(V-b)} - \frac{a'}{T^{0.5}V(V+b)} \quad (3.5)$$

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V(V+b)} \quad (3.6)$$

Donde a es un parámetro función de la temperatura y para el caso de Redlich-Kwong:

$$a = \frac{a'}{T^{0.5}} \quad (3.7)$$

En términos más generales:

$$a = a' f(T) \quad (3.8)$$

En el punto crítico:

$$a_c = a' f(T_c) \quad (3.9)$$

Combinando (3.8) y (3.9):

$$a = a_c \frac{f(T)}{f(T_c)} \quad (3.10)$$

$$a = a_c \alpha(T) \quad (3.11)$$

Donde:

$$\alpha(T) = 1 \quad \text{Cuando } T \rightarrow T_c$$

Para el caso de Redlich Kwong:

$$\alpha \left(\frac{a}{RT} \right) = Tr^{-1/2} \quad (3.12)$$

Nuevamente, cuando se trabaja con ecuaciones de estado, resulta más ventajoso expresar la ecuación (3.6) en función del factor de compresibilidad:

$$Z^3 - Z^2 + (A - B - B^2)Z - AB = 0 \quad (3.13)$$

Donde:

$$A = \frac{aP}{(RT)^2} \quad (3.14)$$

$$B = \frac{bP}{RT} \quad (3.15)$$

$$Z_C = 0.333 \quad (3.16)$$

$$a_C = 0.42748 \frac{R^2 T_C^2}{P_C} \quad (3.17)$$

$$b = 0.086655 \frac{RT_C}{P_C} \quad (3.18)$$

$$\Omega_a = 0.42748 \quad (3.19)$$

$$\Omega_b = 0.086655 \quad (3.20)$$

3.1.6 ECUACIÓN DE SOAVE-REDLICH-KWONG (1972)

En (1972) Soave Redlich Kwong realizó modificaciones a la ecuación de R.K mirando el comportamiento de diferentes fluidos a las mismas condiciones de presión y temperatura reducidas e introdujo el factor acéntrico de Pitzer¹ (ω)

Esta ecuación fue acogida en la industria para sistemas de mezclas de hidrocarburos debido a su relativa simplicidad comparada con ecuaciones como BWRS, y por su capacidad para generar tasas de equilibrio líquido-vapor apropiadas. Con el uso de esta ecuación se incremento la aplicación industrial especialmente en modelamientos composicionales de mezclas.

$$\left(P + \frac{a}{V(V+b)} \right) (V - b) = RT \quad (3.21)$$

¹ El factor acéntrico es una medida de no esfericidad de una molécula ó distanciamiento del comportamiento ideal

Donde: $a \left(\left. \right| \right) = a_c \alpha \left(\left. \right| \right)$

a_c y b se obtienen de manera similar como se procedió para la ecuación de Redlich-Kwong:

$$a_c = \Omega_a \frac{R^2 T_c^2}{P_c} \quad (3.22)$$

$$b = \Omega_b \frac{RT_c}{P_c} \quad (3.23)$$

El factor $\alpha \left(\left. \right| \right)$ se conoce como parámetro de escalamiento y es función de factor acéntrico $w \left(\left. \right| \right)$ y la temperatura reducida $T_r \left(\left. \right| \right)$:

$$\alpha \left(\left. \right| \right) = \alpha \left(w, T_r \left. \right| \right) \quad (3.24)$$

$$\alpha^{1/2} = 1 + m \left(-T_r^{1/2} \right) \quad (3.25)$$

$$m = 0.48 + 1.574w - 0.17w^2 \quad (3.26)$$

La ecuación de Redlich-Kwong en función de Z:

$$Z^3 - Z^2 + (A - B - B^2)Z - AB = 0 \quad (3.27)$$

A , B , Z_C , Ω_a , Ω_b , b y a_C son iguales a los manejados para la ecuación de Redlich-Kwong.

3.1.7 ECUACIÓN DE PENG-ROBINSON (1976)

En 1976 Peng y Robinson, aportaron estimaciones de propiedades volumétricas y presiones de vapor a sistemas multicomponentes con mayor exactitud.

Esta ecuación expresa sus parámetros en función de sus propiedades críticas y el factor acéntrico; cerca del punto crítico los cálculos de compresibilidad y densidad líquida son más exactos.

Generalmente los datos arrojados por P.R son similares a los de Soave, sin embargo es más exacta para calcular densidades líquidas siendo muy utilizada en la industria petrolera.

Peng-Robinson plantearon la siguiente modificación a la ecuación de SRK:

$$\left(P + \frac{a(T)}{V(V+b) + b(V-b)} \right) (V-b) = RT \quad (3.28)$$

$$P = \frac{RT}{(V-b)} - \frac{a(T)}{V(V+b) + b(V-b)} \quad (3.29)$$

$$P = \frac{RT}{(V-b)} - \frac{a(T)}{\left[V + \left(2^{\frac{1}{2}} + 1 \right) b \right] \left[V - \left(2^{\frac{1}{2}} - 1 \right) b \right]} \quad (3.30)$$

4. LA TERMODINÁMICA

La termodinámica se encarga de estudiar procesos de transferencia de calor, asociados al trabajo que se realiza, que se puede presentar en los estados: sólido, líquido y gaseoso. Además estudia cómo es la relación frente a cambios en presión, temperatura y volúmenes de sustancias o mezclas en equilibrio.

La termodinámica se basa en 3 leyes principales.

Ley cero 0 (Equilibrio termodinámico)

Primera ley (Principio de conservación de la energía)

Segunda ley (aumento temporal de entropía)

A continuación se va a hablar de cada una de estas leyes, haciendo hincapié en la segunda ley y el concepto de entropía.

4.1 LA LEY CERO



“La ley cero de la termodinámica nos dice que si tenemos dos cuerpos llamados A y B, con diferente temperatura uno de otro, y los ponemos en contacto, en un tiempo determinado t , estos alcanzarán la misma temperatura, es decir, tendrán ambos la misma temperatura.”

4.2 LA PRIMERA LEY

La Primera ley de la termodinámica se refiere al concepto de *energía interna*, *trabajo* y *calor*. “Dice que si sobre un sistema con una determinada energía interna, se realiza un trabajo mediante un proceso, la energía interna del sistema variará”.



La variación de energía de un sistema se puede presentar por varios factores, uno de ellos es el medio en que se encuentra y la forma de energía que se le este suministrando, así en un sistema cualquiera se puede elevar la temperatura, con un simple rozamiento o la exposición del mismo a una fuente de calor.

4.3 LA SEGUNDA LEY

"No existe un proceso cuyo único resultado sea la absorción de calor de una fuente y la conversión íntegra de este calor en trabajo".

(Principio de Kelvin-Planck)

La energía de un proceso no se crea ni se destruye, solo se transforma; en todo proceso de gasto de energía, ésta va ha ser reemplazada por trabajo, o viceversa, dependiendo del esfuerzo que se realice; el gasto de energía va ser mayor, y la terminación del trabajo va a compensar la energía gastada durante el proceso.

4.4 LA ENTROPÍA

El concepto de entropía fue introducido por primera vez por R. J. Clausius a mediados del siglo XIX. Clausius, ingeniero francés, también formuló un principio para la Segunda ley:

"No es posible proceso alguno cuyo único resultado sea la transferencia de calor desde un cuerpo frío a otro más caliente".

R. J. Clausius

Con base en este principio, Clausius introdujo el concepto de entropía, la cual es una medición de la cantidad de restricciones que existen para que un proceso se lleve a cabo y determina también la dirección de dicho proceso.

$$\Delta S = S_2 - S_1 = \int_1^2 \frac{\delta Q}{T} \quad (4.1)$$

Donde:

δQ = Cantidad de calor intercambiado entre el sistema y el entorno

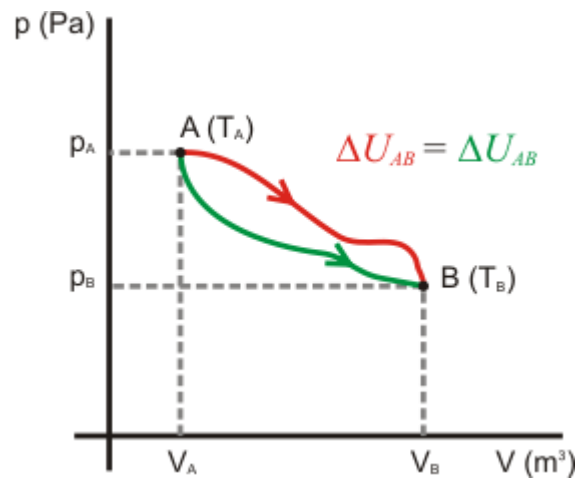
T = Temperatura en R

Entre un estado inicial (1) y final (2) de un sistema termodinámico.

4.5 ENERGÍA INTERNA

La magnitud que designa la energía almacenada por un sistema de partículas se denomina energía interna (U). La energía interna es el resultado de la contribución de la energía cinética de las moléculas o átomos que lo constituyen, de sus energías de rotación, traslación y vibración, además de la energía potencial intermolecular debida a las fuerzas de tipo gravitatorio, electromagnético y nuclear.

La energía interna es una función de estado: su variación entre dos estados es independiente de la transformación que los conecte, sólo depende del estado inicial y del estado final.



Como consecuencia de ello, la variación de energía interna en un ciclo es siempre nula, ya que el estado inicial y el final coinciden:

$$\Delta U_{ciclo} = 0 \quad (4.2)$$

4.6 ENERGÍA INTERNA DE UN GAS IDEAL

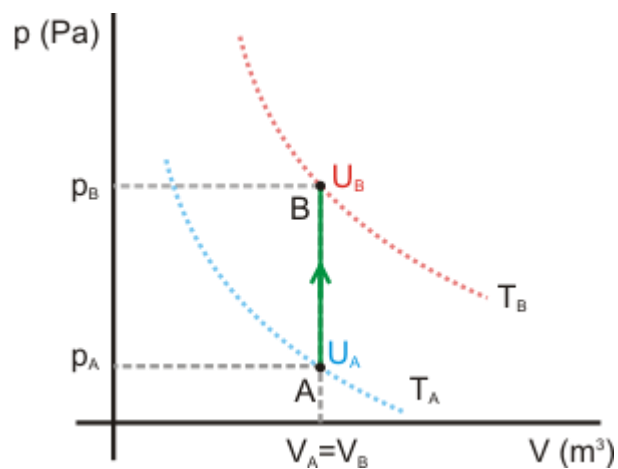
Para el caso de un gas ideal puede demostrarse que la energía interna depende exclusivamente de la temperatura, ya que en un gas ideal se desprecia toda interacción entre las moléculas o átomos que lo constituyen, por lo que la energía interna es sólo energía cinética, que depende sólo de la temperatura. Este hecho se conoce como la ley de Joule.

La variación de energía interna de un gas ideal (monoatómico o diatómico) entre dos estados A y B se calcula mediante la expresión:

$$\Delta U_{AB} = nC_v(T_B - T_A) \quad (4.3)$$

Donde n es el número de moles y C_v la capacidad calorífica molar a volumen constante. Las temperaturas deben ir expresadas en Kelvin.

Para demostrar esta expresión se visualizan dos isothermas caracterizadas por sus temperaturas T_A y T_B como se muestra en la figura.



Un gas ideal sufrirá la misma variación de energía interna (ΔU_{AB}) siempre que su temperatura inicial sea T_A y su temperatura final T_B , según la Ley de Joule, sea cual sea el tipo de proceso realizado.

Se Elije una transformación isocora (dibujada en verde) para llevar el gas de la isoterma T_A a otro estado de temperatura T_B . El trabajo realizado por el gas es nulo, ya que no hay variación de volumen. Luego aplicando el primer principio de la termodinámica:

$$\text{Isócora} = W_{AB} = 0 \Rightarrow Q_{AB} = \Delta U_{AB} \quad (4.4)$$

El calor intercambiado en un proceso viene dado por:

$$Q = nC\Delta T \quad (4.5)$$

Siendo C la capacidad calorífica. En este proceso, por realizarse a volumen constante, se usará el valor C_V (capacidad calorífica a volumen constante). Entonces, se obtiene finalmente:

$$Q_{AB} = nC_V (T_B - T_A) = \Delta U_{AB} \quad (4.6)$$

Esta expresión permite calcular la variación de energía interna sufrida por un gas ideal, conocidas las temperaturas inicial y final y es válida independientemente de la transformación del mismo.

4.7 ENTALPÍA

La entalpía es la cantidad de energía absorbida o cedida durante un proceso termodinámico o sea, la cantidad de energía que un sistema puede intercambiar con su entorno.

La entalpía es la suma de la energía interna de la sustancia y el producto de su presión multiplicado por su volumen. Por tanto la entalpía se define con la siguiente ecuación.

$$H = U + PV \quad (4.7)$$

Donde (todas las unidades son dadas en SI)

- H es la entalpía
- U es la energía interna, (joules)
- P es la presión del sistema, (pascales)
- V es el volumen, (metros cúbicos)

4.8 RELACIONES GENERALES DE du , dh , ds , cv , y cp

En esta sección se desarrollan las relaciones generales con los cambios de energía interna, entalpía y entropía en términos de presión, volumen específico, y temperatura.

Las relaciones desarrolladas permitirán determinar los cambios de estas propiedades.

4.8.1 CAMBIOS DE ENERGÍA INTERNA

Se elige la energía interna como una función de T y V, es decir, $u = u(T, v)$ y se toma su diferenciación total de la ecuación (4.8).

$$du = \left(\frac{\partial u}{\partial T} \right)_v dT + \left(\frac{\partial u}{\partial V} \right)_T dv \quad (4.8)$$

Utilizando la definición de C_v , se obtiene

$$du = c_v dT + \left(\frac{\partial u}{\partial V} \right)_T dv \quad (4.9)$$

Ahora se elige la entropía como una función de T y V ,
es decir, $s = s(T, v)$

y se deriva.

$$ds = T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_v dT + \left(\frac{\partial s}{\partial V} \right)_T dv \quad (4.10)$$

Sustituyendo ésta en T , La relación ds , $du = Tds - P dv$ Se obtiene.

$$du = T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_v dT + \left[T \left(\frac{\partial s}{\partial V} \right)_T - P \right] dv \quad (4.11)$$

Igualando los coeficientes de dT y dv en las ecuaciones. (4.9) y (4.11) da

$$\left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_v = \frac{c_v}{T} \quad (4.12)$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial V} \right)_T = T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_T - P \quad (4.13)$$

Uso de la tercera relación de Maxwell, se obtiene:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial V}\right)_T = T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v - P \quad (4.14)$$

Sustituyendo ésta en la ecuación. (a), se obtiene la relación deseada de du:

$$du = c_v dT + \left[T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v - P \right] dv \quad (4.15)$$

El cambio en la energía interna de un sistema simple compresible asociado con un cambio de estado de (T1, V1) a (T2, v2) está determinado por la integración:

$$u_2 - u_1 = \int_{T_1}^{T_2} c_v dT + \int_{v_1}^{v_2} \left[T\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_v - P \right] dv \quad (4.16)$$

4.8.2 CAMBIOS DE ENTALPÍA

La relación general de dh se determina exactamente de la misma manera. Esta vez se elige la entalpía que es una función de T y P, es decir, $h=h(T, P)$, y diferenciando se tiene:

$$dh = \left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_P dT + \left(\frac{\partial h}{\partial P}\right)_T dp \quad (4.17)$$

Utilizando la definición de cp, se tiene:

$$dh = c_p dT + \left(\frac{\partial h}{\partial P}\right)_T dp \quad (4.18)$$

Ahora se elige la entropía como una función de T y V, es decir, $s = s(T, v)$ y diferenciamos.

$$ds = \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_P dT + \left(\frac{\partial s}{\partial P} \right)_T dp \quad (4.19)$$

Sustituyendo esta en T, La relación ds , $du = Tds - P dv$ Se obtiene.

$$dh = T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_P dT + \left[V + T \left(\frac{\partial s}{\partial P} \right)_T \right] dp \quad (4.20)$$

Igualando los coeficientes de dT y dv en las ecuaciones. (4.18) y (4.20)

$$\left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_P = \frac{c_P}{T} \quad (4.21)$$

$$\left(\frac{\partial h}{\partial P} \right)_T = V + T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_T \quad (4.22)$$

Con el uso de la cuarta relación de Maxwell, se tiene:

$$\left(\frac{\partial h}{\partial P} \right)_T = V - T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P \quad (4.23)$$

Sustituyendo esto en la ecuación. (4.24), se obtiene la relación deseada de dh :

$$dh = c_p dT + \left[V - T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P \right] dP \quad (4.24)$$

El cambio de entalpía de un sistema simple compresible asociado con un cambio de estado de (T1, P1) a (T2, P2) está determinado por la integración:

$$h_2 - h_1 = \int_{T_1}^{T_2} c_p dT + \int_{P_2}^{P_1} \left[V - T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P \right] dP \quad (4.25)$$

En realidad, sólo se necesita para determinar $u_2 - u_1$ de la ecuación (4.16) o $h_2 - h_1$ de la ecuación (4.25), dependiendo de los datos más adecuados que se tengan a la mano.

El otro se puede determinar fácilmente mediante el uso de la definición de entalpía de la siguiente ecuación $H = u + Pv$:

$$h_2 - h_1 = u_2 - u_1 + (P_2 V_2 - P_1 V_1) \quad (4.26)$$

4.8.3 CAMBIOS DE ENTROPÍA

A continuación se desarrollan dos relaciones generales de entropía para variación de un sistema de compresión simple. La primera relación se obtiene mediante la sustitución de la primera derivada parcial ds , ecuación (4.10) por la ecuación (4.12) y la segunda derivada parcial por la tercera relación de Maxwell.

$$ds = \frac{c_v}{T} dT + \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_v dV \quad (4.27)$$

$$Y \quad (4.28)$$

$$s_2 - s_1 = \int_{T_1}^{T_2} \frac{c_v}{T} dT + \int_{V_1}^{V_2} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_v dV$$

La segunda relación se obtiene mediante la sustitución de la primera derivada parcial ds ecuación (4.19) por la ecuación (4.21) y la segunda derivada parcial por la cuarta relación de Maxwell.

$$ds = \frac{c_P}{T} dT - \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P dP \quad (4.29)$$

$$s_2 - s_1 = \int_{T_1}^{T_2} \frac{c_P}{T} dT - \int_{P_1}^{P_2} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P dP \quad \text{Y} \quad (4.30)$$

Cualquier relación puede ser utilizada para determinar la variación de entropía. Esta elección depende de los datos disponibles.

4.9 PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DE LOS FLUIDOS EN SISTEMAS DE PETROLEOS LIVIANOS

Una ecuación de estado es la relación que existe entre dos o más propiedades termodinámicas. En sistemas de un componente y de una fase, la ecuación de estado incluirá tres propiedades, dos de las cuales pueden ser consideradas como independientes. Aunque en principio se podrían plantear relaciones funcionales en que intervengan tres propiedades termodinámicas cualesquiera, las expresiones analíticas de las relaciones entre propiedades han sido limitadas casi completamente a la presión, volumen y temperatura. Debido a la incompleta comprensión de las interacciones intermoleculares, especialmente en los estados líquido y sólido, han sido utilizados métodos empíricos para desarrollar muchas de

las ecuaciones de estado de uso general. Dado que la presión, temperatura y volumen pueden ser medidos directamente, los datos necesarios para evaluar las constantes en tales ecuaciones pueden ser obtenidos experimentalmente. Una nueva ecuación de estado juega un rol central en el desarrollo de valores más exactos de las propiedades termodinámicas de hidrocarburos y mezclas respectivamente. Esta ecuación también suministra un medio para calcular las propiedades.

Esta nueva compilación complementa las tabulaciones de las propiedades del gas en la fase temprana, particularmente la compilación de Canjar y Manning, porque los valores de las propiedades están presentados para la región de líquido comprimido.

Los datos de las propiedades termodinámicas en el líquido, gas y regiones de fluidos densos fueron utilizados simultáneamente en el desarrollo de la nueva ecuación de estado.

Esta nueva ecuación de estado es capaz de predecir propiedades a temperaturas reducidas tan bajas como $T_r = 0.3$ y densidades reducidas tan grandes como $\rho_r = 3.0$

Es por esta razón que puede ser usada para hidrocarburos livianos en la región líquida criogénica en adición a las regiones de altas temperaturas donde ecuaciones tales como las de Benedict Webb – Rubin (BWR) han sido usadas, porque la nueva ecuación de estado puede ser usada para cálculos a computador.

LA NUEVA ECUACIÓN DE ESTADO es usada para la predicción de las propiedades termodinámicas de líquidos, gases y fluidos densos, en función de temperatura T , y densidad molar ρ .

$$\begin{aligned}
P = & \rho RT + \left(B_o RT - A_o - \frac{C_o}{T^2} + \frac{D_o}{T^3} - \frac{E_o}{T^4} \right) \rho^2 + \left(bRT - a - \frac{d}{T} \right) \rho^3 \\
& + \alpha \left(a + \frac{d}{T} \right) \rho^6 + \frac{c\rho^3}{T^2} \left(+ \gamma \rho^2 \right) \exp(-\gamma \rho^2)
\end{aligned}
\tag{4-31}$$

Esta ecuación puede ser usada como el punto de inicio para la predicción de todas las propiedades termodinámicas. Para asegurar la consistencia entre las propiedades pronosticadas, los datos PVT experimentales disponibles de entalpía y presión de vapor se usaron simultáneamente en el análisis de multipropiedades para determinar los parámetros en la ecuación de estado para materiales individuales.

Predicción de la densidad dadas las condiciones de presión – temperatura requieren una solución por ensayo y error. Porque la ecuación (4.31) tiene la misma dependencia de densidad como la ecuación BWR, los métodos de solución de densidad BWR tal como el programa a computador presentado por Jonson y Colver puede ser aplicado fácilmente a la ecuación (4.31). Debe ser ejercitada con cuidado, en tal aplicación porque la ecuación (4.31) puede tener tres o más raíces de densidad a todas las temperaturas bajo la temperatura crítica. Sólo las raíces más pequeñas y más grandes tienen significancia física, correspondientes a las densidades líquidas y de vapor, respectivamente.

El cálculo a computador de la densidad usa el programa de ensayo y error presentado por Jonson y Colver. Para la fase de vapor es usada una densidad inicial estimada en cero con incrementos iguales (más pequeño que 0.1 P/ RT y 0.01 lb- mol/ Cu.Ft) agregado a la densidad en el procedimiento hasta que la presión calculada exceda la presión actual.

La densidad es reducida por el incremento final, el incremento es reducido a través de la división por 10 y luego el nuevo incremento es agregado a la densidad iterativamente hasta que la presión calculada exceda otra vez la presión actual.

Este procedimiento es continuo hasta calcularla y se agrega la presión actual entre una tolerancia específica de (0.001psi) o las dimensiones del incremento de la densidad alcancé un pequeño valor especificado de (0.000001 lb- mol/ Cu, Ft). Para la fase del líquido, el procedimiento para resolver la densidad es similar excepto que la densidad inicial estimada es cambiada por una más grande que la encontrada actualmente y los incrementos son mejor sustraídos que añadidos en el procedimiento interactivo.

La densidad del líquido inicial estimado de 2.5 lb-mol /cu ft y un incremento inicial de 0.05 lb-mol/cu ft pueden ser usadas para la mayoría de materiales.

La entalpía de un compuesto es calculada usando la ecuación:

$$H = (H - H^o) + (H^o - H_o^o) + H_o^o \quad (4.32)$$

H_o^o es la entalpía estándar de formación de los compuestos para elementos a 0 psia y 0 R, y es obtenida de API. $(H^o - H_o^o)$ es la diferencia en la entalpía de los compuestos en un estado de gas ideal a la temperatura de interés y el estado de referencia de 0 R.

La diferencia de entalpía de un gas ideal $(H^o - H_o^o)$ también se obtienen de API. $(H - H_o^o)$, la entalpía inicial es la diferencia de entalpía de un compuesto a condiciones de presión y temperatura de interés y al entalpía de los compuestos en el estado de gas ideal a la misma temperatura.

La entalpía inicial es relacionada a la ecuación de estado por la siguiente ecuación (ϕ convierte unidades de Btu/ Libras a psia Cu.Ft./Lb- Moles)

$$\phi(H - H^0) = \frac{P}{\rho} - RT + \int_b^p \left[P - T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho \right] \frac{d\rho}{\rho^2} \quad (4.33)$$

La expresión de la ecuación de estado para la entalpía inicial tiene la siguiente forma cuando la nueva ecuación de estado proporcionada en la ecuación (4.31) es usada en la ecuación (4.33)

$$\begin{aligned} \phi(H - H^0) = & \left(B_0 RT - 2A_0 - \frac{4C_0}{T^2} + \frac{5D_0}{T^3} - \frac{6E_0}{T^4} \right) \rho + \frac{1}{2} \left(2bRT - 3a - \frac{4d}{T} \right) \rho^2 \\ & + \frac{1}{5} \alpha \left(6a + \frac{7d}{T} \right) \rho^5 + \frac{c}{\gamma T^2} \left[3 - \left(3 + \frac{1}{2} \gamma \rho^2 - \gamma^2 \rho^4 \right) \exp(-\gamma \rho^2) \right] \end{aligned} \quad (4.34)$$

Para que exista consistencia, el valor de la densidad usado en la ecuación (4.34) para el cálculo de la entalpía inicial tiene que ser determinado por la solución de la ecuación (1-1) para las condiciones de presión – temperatura de interés

La programación a computador necesaria para el cálculo de entalpía es sencilla. El procedimiento ha sido discutido en detalle por la Ecuación BWR por Jonson y Colver.

La entropía de un compuesto se calcula usando la ecuación.

$$S = \phi(S - S^0) + S^0 \quad (4.35)$$

Esta ecuación es completamente análoga a la ecuación (4.32). Para la entalpía excepto que la entropía de formación a 0 R, S_0^0 ; es cero por virtud de la tercera ley de la termodinámica. S^0 es la entropía del compuesto en el estado ideal de gas como una unidad de presión y se obtiene del API. La entropía inicial ($S - S^0$) es la diferencia en la entropía del compuesto a la condición de temperatura – presión de

interés y la entropía del compuesto en el estado de gas ideal a la misma temperatura y unidad de presión. La entropía inicial es relacionada a la ecuación de estado por la siguiente ecuación

$$\phi(-S^o) = -R \ln \left(\frac{P}{RT} \right) + \int_0^P \left[\rho R - \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho \right] \frac{d\rho}{\rho^2} \quad (4.36)$$

Cuando la nueva ecuación de estado indicada en la ecuación (4.31) es usada en la ecuación (4.36), la expresión de la ecuación de entropía inicial tiene la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \phi(-S^o) = -R \ln \left(\frac{P}{RT} \right) - \left(B_o R + \frac{2C_o}{T^3} - \frac{3D_o}{T^4} + \frac{4E_o}{T^5} \right) \rho - \frac{1}{2} \left(bR + \frac{d}{T^2} \right) \rho^2 \\ + \frac{\alpha d \rho^5}{5T^2} + \frac{2c}{\gamma T^3} \left[1 - \left(1 + \frac{1}{2} \gamma \rho^2 \right) \exp(-\gamma \rho^2) \right] \end{aligned} \quad (4.37)$$

El valor de la densidad usado en la ecuación (4.37) debe estar determinado por la solución de la ecuación (4.31)

Cálculo en computador de entropía inicial.

Pueden ser hechos fácilmente, siguiendo el procedimiento utilizando por Jonson y Colver para las entalpías iniciales.

Fugacidad. Puede ser expresada en términos de la entalpía inicial y entropía inicial por la relación termodinámica.

$$RT \ln f = H - H^o - T(S - S^o) - \phi \quad (4.38)$$

De esta forma usando las ecuaciones (4.33) y (4.37) en la ecuación (4.38), la expresión de la ecuación de estado para la fugacidad tiene la forma.

$$\begin{aligned}
 RT \ln f = RT \ln \left(\frac{p}{RT} \right) &+ 2 \left(B_0 RT - A_0 - \frac{C_0}{T^2} + \frac{D_0}{T^3} - \frac{E_0}{T^4} \right) \rho + \frac{3}{2} \left(bRT - a - \frac{d}{T} \right) \rho^2 \\
 &+ \frac{6\alpha}{5} \left(a + \frac{d}{T} \right) \rho^5 + \frac{c}{\gamma T^2} \left[1 - \left(1 - \frac{1}{2} \gamma \rho^2 - \gamma^2 - \gamma^2 \rho^4 \right) \exp \left(-\gamma \rho^2 \right) \right]
 \end{aligned}
 \tag{4.39}$$

Como también fue notado para la entalpía y entropía el valor de la densidad usado en la ecuación (4.39) para el cálculo de la fugacidad debe ser determinado resolviendo la ecuación (4.31)

4.10 CORRELACIÓN GENERALIZADA Y PREDICCIÓN DE LAS PROPIEDADES DE LA MEZCLA

Un procedimiento de cálculo predice exactamente los datos termodinámicos y del equilibrio de fluidos para cualquier mezcla o compuesto puro. El procedimiento, es aplicable universalmente y fácilmente adaptable al uso de la computadora, se basa en datos estándar para los compuestos puros y una ecuación de estado generalizada.

El uso de la ecuación de estado para predecir propiedades termodinámicas y el comportamiento del equilibrio vapor - líquido de mezclas industriales, se ha aplicado intensamente. Sin embargo, los métodos han encontrado solamente uso limitado cuando las cantidades apreciables de no-hidrocarburos o de componentes más pesados que el hexano están en la mezcla o cuando la mezcla está a bajas temperaturas.

Estas limitaciones se superan con una ecuación de estado generalizada desarrollada en la investigación reciente. Las propiedades termodinámicas entre mezclas y mezclas en equilibrio vapor – líquido se pueden predecir exactamente usando esta relación generalizada.

Ecuación de Estado

La nueva ecuación de estado es función de la temperatura y de la densidad molar. Ecuación (4.31) mostrada a continuación.

$$P = \rho RT + \left(B_0 RT - A_0 - \frac{C_0}{T^2} + \frac{D_0}{T^3} - \frac{E_0}{T^4} \right) \rho^2 + \left(bRT - a - \frac{d}{T} \right) \rho^3 + \alpha \left(a + \frac{d}{T} \right) \rho^6 + \frac{c\rho^3}{T^2} \left(1 + \gamma \rho^2 \right) \exp(-\gamma \rho^2)$$

Los 11 parámetros de la mezcla (B_0 , A_0 , etc.) en la nueva ecuación de estado se pueden calcular usando las siguientes relaciones, que son análogas a las reglas de mezcla desarrolladas por Bishnoi y Robinson para la ecuación del BWR.

$$B_0 = \sum_i x_i B_{oi} \quad (4.40)$$

$$A_0 = \sum_i \sum_j x_i x_j A_{oi}^{1/2} A_{oj}^{1/2} \left(1 - k_{ij} \right) \quad (4.41)$$

$$C_0 = \sum_i \sum_j x_i x_j C_{oi}^{1/2} C_{oj}^{1/2} \left(1 - k_{ij} \right) \quad (4.42)$$

$$\gamma = \left[\sum_i x_i \gamma_i^{1/2} \right]^2 \quad (4.43)$$

$$b = \left[\sum_i x_i b_i^{1/3} \right]^3 \quad (4.44)$$

$$a = \left[\sum_i x_i a_i^{1/3} \right]^3 \quad (4.45)$$

$$\alpha = \left[\sum_i x_i \alpha_i^{1/3} \right]^3 \quad (4.46)$$

$$c = \left[\sum_i x_i c_i^{1/3} \right]^3 \quad (4.47)$$

$$D_0 = \sum_i \sum_j x_i x_j D_{oi}^{1/2} D_{oj}^{1/2} \left(-k_{ij} \right)^4 \quad (4.48)$$

$$d = \left[\sum_i x_i d_i^{1/3} \right]^3 \quad (4.49)$$

$$E_0 = \sum_i \sum_j x_i x_j E_{oi}^{1/2} E_{oj}^{1/2} \left(-k_{ij} \right)^5 \quad (4.50)$$

En las ecuaciones (4.40 - 4.50), i y j son índices para los componentes y el rango de las sumatorias se extienden de $i = 1$ a $i = n$ y $j = 1$ a $j = n$, donde n es el número total de componentes. B_{oi} , A_{oi} , etc. son los parámetros del componente puro en la ecuación de estado para el i -ésimo componente y x_i es la fracción molar del i -ésimo componente. El parámetro de interacción k_{ij} es una medida de desviación del comportamiento ideal de la solución para las interacciones entre los i -ésimos y los j -ésimos componentes. Así, k_{ij} es cero cuando i iguala a j (interacción del fluido puro) y k_{ij} está cerca de cero para los pares de componentes que forman soluciones casi ideales (por ejemplo, el hidrocarburo parafínico aparece más pesado que el propano). El valor numérico de k_{ij} se diferencia considerablemente de cero cuando el par de componentes forman soluciones altamente no-ideales. Así, los valores exactos de k_{ij} (Tabla 1)* se requieren cuando i o j es un hidrocarburo ligero o un no hidrocarburo. Comparando las predicciones del equilibrio vapor - líquido, la sensibilidad de las predicciones de las propiedades de una cantidad de mezclas tales como densidad y entalpía para valores de k_{ij} pequeños. Por lo tanto, los datos del equilibrio binario vapor - líquido han sido suministrados principalmente para determinar valores de k_{ij} . Las tabulaciones y las correlaciones de los valores de k_{ij} para los pares de componentes encontrados en procesos industriales de hidrocarburos se presentan a continuación.

Parámetros de Ecuación.

Los parámetros de los componentes puros en las ecuaciones (4.40- 4.50) se pueden expresar como las siguientes funciones del factor acéntrico de los componentes w_i , de la temperatura crítica, T_{ci} , y de la densidad crítica ρ_{ci} ,

$$\rho_{ci} B_{oi} = A_1 + B_{1w_i} \quad (4.51)$$

$$\frac{\rho_{ci} A_{oi}}{RT_{ci}} = A_2 + B_{2w_i} \quad (4.52)$$

$$\frac{\rho_{ci} C_{oi}}{RT_{ci}^3} = A_3 + B_{3w_i} \quad (4.53)$$

$$\rho_{ci}^2 \gamma_i = A_4 + B_{4w_i} \quad (4.54)$$

$$\rho_{ci}^2 b_i = A_5 + B_{5w_i} \quad (4.55)$$

$$\frac{\rho_{ci}^2 a_i}{RT_{ci}} = A_6 + B_{6w_i} \quad (4.56)$$

$$\rho_{ci}^3 \alpha_i = A_7 + B_{7w_i} \quad (4.57)$$

$$\frac{\rho_{ci}^2 c_i}{RT_{ci}^3} = A_8 + B_{8w_i} \quad (4.58)$$

$$\frac{\rho_{ci} D_{oi}}{RT_{ci}^4} = A_9 + B_{9w_i} \quad (4.59)$$

$$\frac{\rho_{ci}^2 d_i}{RT_{ci}^2} = A_{10} + B_{10w_i} \quad (4.60)$$

$$\frac{\rho_{ci} E_{oi}}{RT_{ci}^5} = A_{11} + B_{11w_i} \exp(-3.8w_i) \quad (4.61)$$

***Tabla 1.** Valores para los parámetros de iteración Kij para usar en la correlación generalizada (Kij x100), mostrada en anexo A

Los parámetros A_j y B_j ($j= 1, 2... 11$) (**Tabla 2**)* fueron determinados simultáneamente usando los datos de hidrocarburos parafínicos normales del metano normal hasta el n- octano en el análisis de las multipropiedades de PVT, los datos de entalpía y presión de vapor. Los valores de la temperatura crítica, T_{ci} , del densidad crítica, ρ_{ci} y del factor acéntrico, w_i , usados en estos cálculos se muestran en la (**Tabla 3**)*.

Para la consistencia en la predicción de cálculos de las propiedades termodinámicas, los valores del T_{ci} , ρ_{ci} y w_i dado en la (**Tabla 3**)* deben ser usados en la correlación. Particularmente, los valores de w_i de la (**Tabla 3**)* en ser utilizados, puesto que hay considerable desacuerdo en los valores reportados del factor acéntrico en referencias estándar. Debido al desacuerdo notable en el factor acéntrico reportado, los valores del parámetro w_i son consistente con la actual correlación se han determinado y se dan en la (**Tabla 3**)* para veintitrés fluidos.

Propiedades termodinámicas.

El método para predecir las propiedades termodinámicas de la ecuación de estado de mezclas de fluidos, tales como densidad, entalpía inicial y entropía inicial es virtualmente idéntica al método descrito previamente para los componente puros.

La única diferencia es que utilizamos parámetros de la mezcla en lugar de componentes puros utilizados en la ecuación estado. Las entalpías y entropías molares para las mezclas de gases ideales se deben calcular como un promedio en peso de la fracción molar de las entalpías y entropías del gas ideal.

***Tabla 2.** Los Valores de parámetros A_j , y B_j para el uso con la ecuación de estado generalizada mostrada en anexo A

***Tabla 3.** Propiedades físicas de las sustancias puras usadas en la ecuación de estado generalizada mostrada en anexo A

$$H^0 \sum x_i M_i = \sum x_i H_i^0 M_i \quad (4.62)$$

$$S^0 \sum x_i M_i = \sum x_i S_i^0 M_i - R \sum x_i \ln x_i \quad (4.63)$$

En las ecuaciones (4.62) y (4.63), H^0 y H_i^0 tienen las unidades en BTU /lb. °R; H^0 y S^0 son la entalpía y la entropía de la mezcla de gases ideales, mientras que H_i^0 y S_i^0 son la entalpía del gas ideal y la entropía del i-ésimo componente. El peso molecular promedio de la mezcla es la suma de los productos de las fracciones molares x_i , y de los pesos moleculares de los componentes, M_i .

5. ALGORITMO

Para el desarrollo del programa se tomó como base fundamental el libro de KENNETH E. STARLING, DETERMINACIÓN DE LAS PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DE HIDROCARBÚROS LIVIANOS A PARTIR DE LA ECUACIÓN DE ESTADO, en este libro se realizó un programa utilizando el lenguaje de programación Fortran, el cual obtuvo buenos resultados, en la predicción de propiedades termodinámicas tales como: entalpía, entropía y fugacidades, tanto para componentes puros como para mezcla de gases. Debido a los constantes avances de la tecnología e información se decidió realizar el programa pero montado en Visual Basic; un lenguaje de programación mucho más práctico, eficiente y fácil de operar. Fue necesario realizar una recopilación bibliográfica para conocer las distintas ecuaciones utilizadas, y las que mejor se acoplaran a una eficiente programación, tomando como base las ecuaciones señaladas de Kennet E. Starling. Se procedió a realizar una serie de procesos iterativos para ajustar por exceso y por defecto el grado de tolerancia y exactitud de los cálculos, consiguiendo con ésta una aproximación muy exacta de lo previsto anteriormente y con más precisión por la tecnología usada en la actualidad.

Con el fin de sistematizar este cálculo, para obtener mejores resultados en menor tiempo, se desarrolló este programa en lenguaje Visual Basic 6.0, debido a las ventajas que ofrece en cuanto a velocidad de ejecución, convirtiéndolo en una herramienta sencilla de utilizar, rápida y confiable.

La gran diferencia que se tiene éste programa con respecto al anterior es que el programa de Fortran no da datos de mezclas. El programa montado en Visual

Basic arroja datos de mezclas multicomponente en cada fase y la región de saturación, haciéndolo más versátil, y actualizado con respecto al anterior además, éste programa tiene la posibilidad de exportar los datos obtenidos en forma de tablas a Excel, un lenguaje muy básico y fácil de operar en el cual se pueden hacer gráficas y cálculos comparativos.

5.1 CÁLCULO DE PROPIEDADES PARA COMPONENTES PUROS

El cálculo de propiedades para componentes puros de hidrocarburos ligeros y no hidrocarburos, nos brinda una base fundamental en el análisis conjunto de propiedades, por tal motivo se explica el proceso de cálculo paso a paso para propiedades como: volumen específico, entalpía, entropía, y fugacidad.

5.1.1 CÁLCULO DE DENSIDAD MOLAR Y VOLUMEN ESPECÍFICO.

Para el cálculo de densidad molar y volumen específico se trabajó con la ecuación de estado generalizada de Kennet E. Starling, ecuación (4.31), mostrada a continuación.

$$P = \rho RT + \left(B_o RT - A_o - \frac{C_o}{T^2} + \frac{D_o}{T^3} - \frac{E_o}{T^4} \right) \rho^2 + \left(bRT - a - \frac{d}{T} \right) \rho^3 + \alpha \left(a + \frac{d}{T} \right) \rho^6 + \frac{c\rho^3}{T^2} \left(+ \gamma \rho^2 \right) \exp(-\gamma \rho^2)$$

De la ecuación (4.31) conocemos presión P (psi), temperatura T (R) y los parámetros (R, B_o, A_o, C_o, D_o, E_o, b, a, c, α, γ) para cada componente. Se encuentra en la **Tabla 4***.

***Tabla 4** Parámetros de la ecuación generalizada para cada componente mostrada en anexo A.

Reemplazamos en la ecuación general y por medio de iteraciones (método de Newton -Raphson) se obtiene la densidad molar ρ ,

Para calcular volumen específico v , se utiliza la siguiente ecuación $v = 1/(\rho \cdot M)$

Se sabe que el volumen específico es el inverso de la densidad donde:

M es el peso molecular del componente en Lbs /lbmol. Con $R = 10,7335$ la constante universal para gas.

Cada componente tiene un rango de temperatura en °F y el rango de presiones que va de 1 psia a 8000 psia

5.1.2 CÁLCULO DE ENTALPÍA.

Para el cálculo de entalpía se trabajó con la ecuación (4.32) mostrada a continuación.

$$H = \left(H - H^o \right) + \left(H^o - H_o^o \right) + H_o^o$$

Como conocemos los parámetros, las temperaturas (absoluta en R) y densidades molares podemos reemplazar en la ecuación (4.34):

$$\phi \left(H - H^o \right) = \left(B_o RT - 2A_o - \frac{4C_o}{T^2} + \frac{5D_o}{T^3} - \frac{6E_o}{T^4} \right) \rho + \frac{1}{2} \left(2bRT - 3a - \frac{4d}{T} \right) \rho^2 + \frac{1}{5} \alpha \left(6a + \frac{7d}{T} \right) \rho^5 + \frac{c}{\gamma T^2} \left[3 - \left(3 + \frac{1}{2} \gamma \rho^2 - \gamma^2 \rho^4 \right) \exp \left(-\gamma \rho^2 \right) \right]$$

Para calcular la primera expresión $(H - H^0)$, multiplicamos $\phi (H - H^0)$ por la constante 0.1850529 y se divide por el peso molecular del componente **Tabla 5.***

$$(H - H^0) = \{\phi (H - H^0) * 0.1850529\} / M \quad (5.1)$$

Para calcular la segunda expresión $(H^0 - H_0^0)$ la diferencia en el estado de gas ideal se utiliza la ecuación (5.2), donde T es la temperatura en R

$$(H^0 - H_0^0) = BT + CT^2 + DT^3 + ET^4 + FT^5 \quad (5.2)$$

Los parámetros B, C, D, E, F y G para cada componente se obtienen de la **Tabla 7**
 H_0^0 , la entalpía de formación a 0R y 0 Psi se toma de la **Tabla 6**.

*Tabla 5 Peso molecular del componente mostrada en anexo A

*Tabla 6 Entalpía de formación a 0 R y 0 PSI mostrada en anexo A

*Tabla 7 Parámetros para calcular entalpía y entropía en el estado de gas ideal mostrados en anexo A

5.1.3 CÁLCULO DE ENERGÍA INTERNA.

Para el cálculo de Energía Interna se utiliza la siguiente ecuación:

$$U = H - (P * v * c) \quad (5.3)$$

Donde:

U= Energía Interna del componente puro (Btu/lbm)

H= Entalpía del componente puro (Btu/lbm)

c= Volumen específico del componente puro (ft³/lbm)

P= Presión (PSI)

c= Constante de conversión (0.18505)

5.1.4 CÁLCULO DE ENTROPÍA.

Para el cálculo de entropía se trabajo con la ecuación de estado generalizada de Kennet E. Starling, ecuación (4.35), mostrada a continuación.

$$S = \left(-S^o \right) + S^o$$

Como conocemos los parámetros, las temperaturas absolutas en R y densidades molares podemos reemplazar en la ecuación (4.37) mostrada a continuación.

$$\left(-S^o \right) = -R \ln \left(\frac{P}{RT} \right) - \left(B_o R + \frac{2C_o}{T^3} - \frac{3D_o}{T^4} + \frac{4E_o}{T^5} \right) \rho - \frac{1}{2} \left(bR + \frac{d}{T^2} \right) \rho^2 + \frac{\alpha d \rho^5}{5T^2} + \frac{2c}{\gamma T^3} \left[1 - \left(1 + \frac{1}{2} \gamma \rho^2 \right) \exp \left(-\gamma \rho^2 \right) \right]$$

Para calcular la primera expresión $(S - S^0)$, se multiplica $\phi(S - S^0)$ por la constante 0.1850529 y dividimos por el peso molecular del componente:

$$(S - S^0) = \{\phi(S - S^0) * 0.1850529\} / M \quad (5.4)$$

Para calcular la segunda expresión S^0 se utiliza la siguiente ecuación donde T es la temperatura en R

$$S^0 = B \ln \left(\frac{P}{P^0} \right) + 2CT + \frac{3}{2}DT^2 + \frac{4}{3}ET^3 + \frac{5}{4}FT^4 + G \quad (5.5)$$

Los parámetros B, C, D, E, F y G para cada componente se obtienen de la Tabla 7*

5.1.5 CÁLCULO DE FUGACIDAD.

Para el cálculo de fugacidad se trabajó con la ecuación de estado generalizada de Kennet E. Starling mostrada a continuación.

La expresión de fugacidad f/P está dada por

$$f = e^{\left[\frac{H - H^0 - T \phi - S^0 \psi}{RT} \right]} \quad (5.6)$$

*Tabla 7 Parámetros para calcular Entalpía y Entropía en el estado de Gas ideal mostrados en Anexo A

Las expresiones $\phi(H - H^0)$ y $\phi(S - S^0)$ fueron calculados en la entalpía y entropía respectivamente R y T son conocidos y e es Euler. Luego se divide f por la presión P en (Psi).

Reemplazando los parámetros (R, B_0 , A_0 , C_0 , D_0 , E_0 , b, a, c, α , γ) para cada componente en la siguiente ecuación también calculamos fugacidad. Luego se divide f por la presión P en (Psi).

$$f = e^{\left[\frac{A+B+C}{RT} \right]} \quad (5.7)$$

Donde:

$$A = RT \ln \left(\frac{P}{P^0} \right) + 2 \left(B_0 RT - A_0 - \frac{C_0}{T^2} + \frac{D_0}{T^3} - \frac{E_0}{T^4} \right) \rho$$

$$B = \left[\frac{3}{2} \left(bRT - a - \frac{d}{T} \right) \rho^2 + \frac{6\alpha}{5} \left(a + \frac{d}{T} \right) \rho^5 \right]$$

$$C = \frac{c}{\gamma T^2} \left[1 - \left(1 - \frac{1}{2} \gamma \rho^2 - \gamma^2 \rho^4 \right) \exp \left(-\gamma \rho^2 \right) \right]$$

5.2 CÁLCULO DE MEZCLAS.

Las mezclas de hidrocarburos ligeros y no hidrocarburos son fundamentales en el análisis conjunto de propiedades, por tal motivo se explica el proceso de cálculo para propiedades como volumen específico, entalpía, entropía, y fugacidad. De una forma clara y fácil de operar.

5.2.1 PARA CALCULAR DENSIDAD MOLAR Y VOLUMEN ESPECÍFICO

Para el cálculo de densidad molar y volumen específico para la mezcla se trabajó con la ecuación de estado generalizada de Kennet E. Starling, ecuación (4.31) mostrada a continuación.

$$P = \rho RT + \left(B_o RT - A_o - \frac{C_o}{T^2} + \frac{D_o}{T^3} - \frac{E_o}{T^4} \right) \rho^2 + \left(bRT - a - \frac{d}{T} \right) \rho^3 + \alpha \left(a + \frac{d}{T} \right) \rho^6 + \frac{c\rho^3}{T^2} \left(+ \gamma \rho^2 \right) \exp(-\gamma \rho^2)$$

Se conoce P (psi), T(R) y los parámetros (R, B_o, A_o, C_o, D_o, E_o, b, a, c, α, γ) para cada componente, entonces se calcula los parámetros para la mezcla así:

Se desarrolla las ecuaciones desde (4.40) hasta (4.50) con los parámetros puros (**Tabla 7**)*; donde se realiza las respectivas sumatorias o dobles sumatorias según el caso; X_i es la fracción molar que es dato de entrada y K_{ij} es el parámetro de iteración el cual se toma de la **Tabla 1**.*

Se reemplaza en la ecuación general y por medio de iteraciones (método de Newton -Rapbson) se obtiene la densidad molar ρ,

Para calcular volumen específico v, v= 1/(ρ*M_m)

Donde M_m es el peso molecular de la mezcla expresado así:

$$M_m = \sum_i x_i M_i$$

Y M_i es el peso molecular del respectivo componente.

5.2.2 CÁLCULO DE ENTALPÍA.

Para el cálculo de entalpía para la mezcla se trabajó con la ecuación de estado generalizada de Kennet E. Starling, ecuación (4.32) mostrada a continuación.

$$H = \phi(H - H^o) + \phi^o(H^o - H_o^o) + H_o^o$$

Como se conocen los parámetros de la mezcla, las temperaturas (absoluta en R) y densidades molares se puede reemplazar en la ecuación (4.34) mostrada a continuación.

$$\phi(H - H^o) = \left(B_o RT - 2A_o - \frac{4C_o}{T^2} + \frac{5D_o}{T^3} - \frac{6E_o}{T^4} \right) \rho + \frac{1}{2} \left(2bRT - 3a - \frac{4d}{T} \right) \rho^2 + \frac{1}{5} \alpha \left(6a + \frac{7d}{T} \right) \rho^5 + \frac{c}{\gamma T^2} \left[3 - \left(3 + \frac{1}{2} \gamma \rho^2 - \gamma^2 \rho^4 \right) \exp(-\gamma \rho^2) \right]$$

Para calcular la primera expresión (H -H^o), ecuación (5.1). Se multiplica φ (H -H^o) por la constante 0.1850529 y se divide por el peso molecular de la mezcla M_m:

$$(H - H^o) = \{ \phi(H - H^o) * 0.1850529 \} / M_m$$

Para calcular la segunda y tercera expresión (H^o -H_o^o) y H_o^o, se utiliza las expresiones que se calculan por cada componente que interviene en la mezcla y se llevan a las siguientes ecuaciones respectivamente:

$$\phi^o(H^o - H_o^o) = \frac{\sum x_i \phi^o(H_o^o - H_{oi}^o) M_i}{\sum x_i M_i} \quad (5.8)$$

$$H_o^o = \frac{\sum x_i H_{oi}^o M_i}{\sum x_i M_i} \quad (5.9)$$

5.2.3 CÁLCULO DE ENERGÍA INTERNA.

Para el cálculo de Energía Interna se utiliza la misma ecuación utilizada para componentes puros a partir del cálculo de las propiedades de la mezcla, ecuación (5.1)

$$U = H - (P * v * c)$$

Donde:

U= Energía Interna de la mezcla (Btu/lbm)

H= Entalpía de la mezcla (Btu/lbm)

c= Volumen Especifico de la mezcla (ft³/lbm)

P= Presión (PSI)

c= Constante de conversión (0.18505)

5.2.4 CÁLCULO DE ENTROPÍA.

Para el cálculo de entropía se utiliza la misma ecuación usada para componentes puros a partir del cálculo de las propiedades de la mezcla, ecuación (4.35) mostrada a continuación.

$$s = \left(-s^o \right) + s^o$$

Como se conocen los parámetros de la mezcla, las temperaturas absolutas en (R) y densidades molares se pueden reemplazar en la ecuación (4.37):

$$\left(-s^o \right) + s^o = -R \ln \left(\frac{P}{RT} \right) - \left(B_o R + \frac{2C_o}{T^3} - \frac{3D_o}{T^4} + \frac{4E_o}{T^5} \right) \rho - \frac{1}{2} \left(bR + \frac{d}{T^2} \right) \rho^2 + \frac{\alpha d \rho^5}{5T^2} + \frac{2c}{\gamma T^3} \left[1 - \left(1 + \frac{1}{2} \gamma \rho^2 \right) \exp \left(-\gamma \rho^2 \right) \right]$$

Para calcular la primera expresión $(S - S^0)$, se multiplica $\phi(S - S^0)$ por la constante 0.1850529 y se divide por el peso molecular de la mezcla M_m :

$$(S - S^0) = \{\phi(S - S^0) * 0.1850529\} / M_m$$

Para calcular la segunda expresión S^0 , se utiliza la siguiente ecuación:

$$S^0 = \frac{\sum x_i S_i^0 M_i - R \sum x_i \ln x_i}{\sum x_i M_i} \quad (5.10)$$

Donde S_i^0 es la entropía de formación a 0R para cada componente que interviene en la mezcla.

5.2.5 CÁLCULO DE FUGACIDAD.

Para el cálculo de fugacidad para la mezcla, se utiliza la misma ecuación usada para componentes puros a partir del cálculo de las propiedades de la mezcla, ecuación (5.6), mostrada a continuación.

La expresión de fugacidad f/P está dada por

$$f = e^{\left[\frac{\phi(H - H^0) - T \phi(S - S^0)}{RT} \right]}$$

Las expresiones $\phi(H - H^0)$ y $\phi(S - S^0)$ fueron calculados en la entalpía y entropía respectivamente para mezclas, R y T son conocidos y e es Euler. Luego se divide f por la presión P en (Psi), ecuación (5.7).

$$f = e^{\left[\frac{A+B+C}{RT} \right]}$$

Donde:

$$A = RT \ln \left(\frac{p}{p^0} \right) + 2 \left(B_0 RT - A_0 - \frac{C_0}{T^2} + \frac{D_0}{T^3} - \frac{E_0}{T^4} \right) \rho$$

$$B = \left[\frac{3}{2} \left(bRT - a - \frac{d}{T} \right) \rho^2 + \frac{6\alpha}{5} \left(a + \frac{d}{T} \right) \rho^5 \right]$$

$$C = \frac{c}{\gamma T^2} \left[1 - \left(1 - \frac{1}{2} \gamma \rho^2 - \gamma^2 \rho^4 \right) \exp \left(-\gamma \rho^2 \right) \right]$$

6. CONCLUSIONES

- Se elaboró un estado del arte destacando las ecuaciones termodinámicas asociadas a hidrocarburos ligeros.
- El programa (Software) cumplió con las expectativas y parámetros de forma clara y muy precisa al ser comparado con programas como (CMG) y el libro guía.
- Es el primer software implementado tanto para componentes puros como para mezclas multicomponente de hidrocarburos ligeros utilizando la ecuación de estado de Kenneth Starling.
- El Software gráfica cada una de las propiedades, isotérmica e isobáricamente tanto para componentes puros como para mezclas multicomponente.
- El software tiene la capacidad de exportar los datos a Excel.

7. RECOMENDACIONES

- Se recomienda instalar y correr el programa (software) en Windows XP.
- Se recomienda leer atentamente el manual antes de operar el programa.

8. VALIDACIÓN DE LOS DATOS

- Se realizó la validación de los datos obtenidos, comparando el resultado con la tabulación del libro guía STARLING Kenneth. "Fluid Thermodynamic Properties for Light Petroleum systems". Houston, Texas 1973, dando un error de menos del 1 %.
- De igual forma se realizó la misma validación con el software CMG, dando datos de densidades y volúmenes específicos, con un error del 1 %.

BIBLIOGRAFIA

- STARLING Kenneth. "Fluid Thermodynamic Properties for Light Petroleum systems". Houston, Texas 1973.
- SEPÚLVEDA, Jairo Antonio. PINZÓN, Carmen. BONILLA, Luis Fernando. "Comportamiento de Fases de Hidrocarburos", USCO, Neiva 2007.
- YUNUS, A, Cengel. BOLES, A, Michael. "Thermodynamic an Engineering Approach, Fifth Edition". Mexico 2006.
- SANDLAETA, Stanley J."Termodinámica en la Ingeniería Química ". 1981.
- VANWYLEN, Gordon J. "Fundamentos de Termodinámica ". México 1979.
- HUANG, Francis F. "Ingeniería Termodinámica: Fundamentos y Aplicaciones ". México 1994.
- BUSTAMANTE, Sandra. Artículo "La Termodinámica y el concepto de entropía". Monografías1999.
- Mc-CAIN, D. Willian."The Properties of petroleum fluids". Oklahoma 1990
- TAREK_ Ahmed, Ph.D., P.E. "Equations of State and PVT Analysis". Texas 2007

ANEXO A TABLAS

metano	etileno	etano	propileno	propano	i- Butano	n- Butano	i-Pentano	n-Pentano	Hexano	Heptano	Octano	Nonano	Decano	Undecano	Nitrogeno	Co2	H2S	
0	1	1	2.1	2.3	2.75	3.1	3.6	4.1	5	6	7	8.1	9.2	10.1	2.5	5	5	Metano
	0	0	0.3	0.31	0.4	0.45	0.5	0.6	0.7	0.85	1	1.2	1.3	1.5	7	4.8	4.5	Etileno
		0	0.3	0.31	0.4	0.45	0.5	0.6	0.7	0.85	1	1.2	1.3	1.5	7	4.8	4.5	Etano
			0	0	0.3	0.35	0.4	0.45	0.5	0.65	0.8	1	1.1	1.3	10	4.5	4	Propileno
				0	0.3	0.35	0.4	0.45	0.5	0.65	0.8	1	1.1	1.3	10	4.5	4	Propano
					0.0	0	0.08	0.1	0.15	0.18	0.2	0.25	0.3	0.3	11	5	3.6	i- Butano
						0	0.08	0.1	0.15	0.18	0.2	0.25	0.3	0.3	12	5	3.4	n- Butano
							0	0	0	0	0	0	0	0	13.4	5	2.8	i-Pentano
								0	0	0	0	0	0	0	14.8	5	2	n-Pentano
									0	0	0	0	0	0	17.2	5	0	Hexano
										0	0	0	0	0	20	5	0	Heptano
											0	0	0	0	22.8	5	0	Octano
												0	0	0	26.4	5	0	Nonano
													0	0	29.4	5	0	Decano
														0	32.2	5	0	Undecano
															0	0	0	Nitrogeno
																0	3.5	Co2
																	0	H2S

Tabla 1. Valores para los parámetros de iteración Kij para usar en la correlación generalizada (Kij x100)

parámetros suscriptos (j)	valores de los parámetros	
	Aj	Bj
1	0.443690	0.115449
2	1.284380	- 0.920731
3	0.356306	1.7087100
4	0.544979	-0. 270896
5	0.528629	0 349261
6	0.484011	0 754130
7	0.0705233	- 0.0444480
8	0.504087	1.3224500
9	0.0307452	0.179433
10	0.0732828	0.463492
11	0.006450	- 0.0221430

Tabla 2. Los Valores de parámetros Aj, y Bj para el uso con la ecuación de estado generalizada

Componente	Temperatura crítica °F	Densidad Crítica Lb-mol/cu.ft	Peso molecular	Factor Acentrico
Metano	-116,43	0,6274	16,043	0,013
Etano	90,03	0,4218	30,02	0,1018
Propano	206,13	0,3121	44,097	0,157
i- Butano	274,96	0,2373	58,124	0,183
n- Butano	305,67	0,2448	58,124	0,197
i- Pentano	369	0,2027	72,147	0,226
n- Pentano	385,42	0,2007	72,147	0,252
n- Hexano	453,45	0,1696	86,178	0,302
n- Heptano	512,85	0,1465	100,198	0,353
n- Octano	563,79	0,1284	114,224	0,412
n- Nonano	610,5	0,115	128,25	0,475
n- Decano	651,9	0,1037	142,276	0,54
n- Undecano	692,31	0,0946	156,3	0,6
Etileno	49,82	0,5035	28,54	0,101
Propileno	197,4	0,3449	42,081	0,15
Nitrogeno	-232,6	0,6929	28,013	0,035
Dioxido de carbono	87,8	0,6641	44,011	0,21
Sulfuro de Hidrogeno	212,7	0,6571	34,08	0,105
Ciclohexano	535,6	0,2027	84,156	0,21
Benceno	552	0,2401	78,108	0,215
Oxido Nitroso	97,77	0,6883	44,02	0,155
Oxido Nitrico	-135,69	1,0764	30,01	0,6
Tolueno	605,5	0,1924	92,134	0,26

Tabla 3. Propiedades Físicas de las sustancias puras usadas en la ecuación de estado generalizada

Componente	Metano	Etano	Propano	Butano	Pentano	Hexano	Heptano	Octano	Etileno	Propileno	Dióxido de Carbono	Sulfuro de Hidrogeno	Nitrogeno	Isobutano	Isopentano
R	10,7335	10,7335	10,7335	10,7335	10,7335	10,7335	10,7335	10,7335	10,7335	10,7335	10,7335	10,7335	10,7335	10,7335	10,7335
B	0,723251	0,826059	0,964762	1,56588	2,44417	2,66233	3,60493	4,86965	0,747945	0,114457	0,394117	0,297508	0,677022	1,8789	1,27752
A	7520,29	13439,3	18634,7	32544,7	51108,2	45333,1	77826,9	81690,6	12133,9	6051,36	6592,03	10586,3	4185,05	37264	35742
C	271092000	2951950000	7961780000	13743600000	22393100000	52606700000	61566200000	99654600000	1632030000	9747620000	2959020000 0	2114960000 0	1379360000	1,0141E+1 0	2,2843E+1 0
D	10773700000	2,57477E+11	4,53708E+11 1	3,33159E+11	1,01769E+12	5,52158E+12	7,77123E+12	7,90575E+12	51756300000	7,0592E+11	4,0915E+11 1	4,8652E+11 0	1,9518E+11 0	8,5318E+11 1	1,4212E+12 2
E	30112200000	1,46819E+13	2,56053E+13 3	2,30902E+12	3,9086E+13	6,26433E+14	6,36251E+12	3,46419E+13	16170600000	3,4125E+13	1,029E+10	3,9323E+11 0	1,2165E+11 2	8,4086E+11 3	2,4133E+11 3
b	0,925404	3,11206	5,46248	9,14066	16,607	29,4983	27,4415	10,5907	2,62914	7,64114	0,971443	2,53315	0,83347	8,58663	19,8384
a	2574,89	22404,5	40066,4	71181,8	162185	434517	359087	131646	15988,1	81880,4	5632,85	20511	1404,59	47990,7	204344
d	47489,1	702189	15052000	36423800	38852100	32746000	8351150	185906000	903550	5419350	59929,7	19973,1	31189,4	21686300	34922000
alfa	0,468828	0,909681	2,01402	4,00985	7,06702	9,7023	21,8782	34,5124	0,589158	1,36532	0,395525	0,165961	0,302696	4,23987	6,16154
c	437222000	6818260000	2744610000 0	70004400000	1,35286E+11	3,18412E+11	3,74876E+11	6,42053E+11	4097250000	2,9414E+10	274668000 0	436132000 0	84431700	4,0676E+11 0	1,2908E+11 1
gama	1,4864	2,99656	4,56182	7,54122	11,8593	14,872	24,7604	21,9888	2,27971	4,07919	1,64916	1,20447	1,10011	7,11486	11,7384
M	16,043	30,02	44,097	58,124	72,147	86,178	100,198	114,224	28,054	42,081	44,011	34,08	28,013	58,124	72,147

Tabla 4. Parámetros de la ecuación generalizada para cada componente.

Componente	Peso Molecular
<i>Metano</i>	16,031
<i>Etano</i>	30,046
<i>Propano</i>	44,062
<i>Butano</i>	58,121
<i>Pentano</i>	72,147
<i>Hexano</i>	86,172
<i>Heptano</i>	100,198
Componente	Peso Molecular
<i>Octano</i>	114,224
<i>Etileno</i>	28,054
<i>Propileno</i>	42,046
<i>Dióxido de Carbono</i>	44,011
<i>Sulfuro de Hidrogeno</i>	34,08
<i>Nitrógeno</i>	28,016
<i>Isobutano</i>	58,121
<i>Isopentano</i>	72,147

Tabla 5. Peso molecular de cada componente

Componente	H_o^o
Metano	-1796,5
Etano	-987,7
Propano	-794,69
Butano	-725,01
Pentano	-674
Hexano	-637,32
Heptano	-622,4
Octano	-592,7
Etileno	957
Propileno	374,8
Dióxido de Carbono	-3842,92
Sulfuro de Hidrogeno	-217,56
Nitrógeno	-0,8746
Isobutano	-781,99
Isopentano	-700,03

Tabla 6. Entalpía de formación a 0 R y 0 PSI

Componente	Metano	Etano	Propano	Butano	Pentano	Hexano	Heptano	Octano	Etileno	Propileno	Dioxido de Carbono	Sulfuro de Hidrogeno	Nitrogeno	Isobutano	Isopentano
A	-2,83857	-0,01422	0,68715	7,22814	9,04209	12,99182	13,08205	15,33297	24,77789	13,11935	0,09688	-0,23279	-0,65665	1,45956	17,69412
B	0,538285	0,264612	0,160304	0,099687	0,111829	0,089705	0,089776	0,077802	0,149526	0,10163	0,158843	0,237448	0,254098	0,09907	0,015946
C	-0,000211409	-0,000024568	0,000126084	0,000266548	0,000228515	0,000265348	0,000260917	0,000279364	0,000163711	0,00023305	-3,3712E-05	-2,3234E-05	-1,6624E-05	0,00023874	0,00038245
D	3,39276E-07	2,91402E-07	1,8143E-07	5,4073E-08	8,6331E-08	5,7782E-08	6,3445E-08	5,2031E-08	8,1958E-08	4,016E-08	1,4811E-07	3,8812E-08	1,5302E-08	9,1593E-08	-2,7557E-08
E	-1,16432E-10	-1,28103E-10	-9,18913E-11	-4,29269E-11	-5,44649E-11	-4,52211E-11	-4,84706E-11	-4,63118E-11	4,71884E-11	-3,3668E-11	-9,662E-11	-1,1329E-11	-3,0995E-12	-5,9405E-11	-1,4304E-11
F	1,38961E-14	1,81348E-14	1,35485E-14	6,6958E-15	8,1845E-15	7,02597E-15	7,55464E-15	7,50735E-15	6,96487E-15	5,2391E-15	2,0738E-14	1,1484E-15	1,5167E-16	9,0965E-15	2,9568E-15
G	-0,175394	0,264653	0,38023	0,439201	0,2616079	0,290243	0,228344	0,233791	0,90702	0,752119	0,273325	0,115401	0,238184	0,396845	0,715514

Tabla 7. Parámetros para calcular Entalpía y Entropía en el estado de Gas ideal.

MANUAL DE USUARIO

El programa se inicia y tiene la siguiente presentación:

Universidad Surcolombana

Cálculo de propiedades termodinámicas a partir de la ecuación de Estado de Kenneth E. Staling

Seleccione el tipo de calculo

1. Seleccione la sustancia 2. Seleccione el calculo

Metano Calculo Puntual

Observación

Los rangos de Temperatura deben estar entre :
(-260 °F/ 199.67 R/ -162.2 °C/ 110.9 K) y
(500 °F/ 959.67 R/ 260 C/ 533.15 K).
Los rangos de Presión deben estar entre :
(10 Psi/ .68 Atm/ .689 Bars/ 68946.49 Pa) y
(8000 Psi/ 544.36 Atm/ 551.571 Bars/ 55157198.01 Pa)

Calculo Puntual

Temperatura: 10 Fahrenheit

Presion: 10 PSI

Propiedades

Densidad Molar (lbmol/ft ³)	0.001988
Volumen Especifico (ft ³ /lbm)	31.358688
Entalpia (Btu/lbm)	-1560.877789
Energía Interna (Btu/lbm)	-1874.464664
Entropia (Btu/lbm * R)	2.749004
Fugacidad (1/Psia)	0.998036

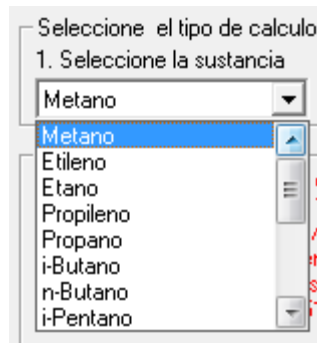
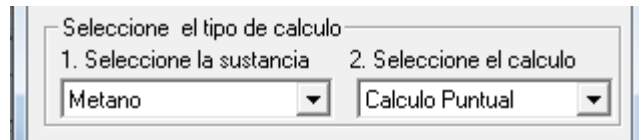
Calcular

Para Sustancias Puras

Primero se selecciona una sustancia de las 15 opciones que se despliegan del combo 1. "Seleccione la sustancia":

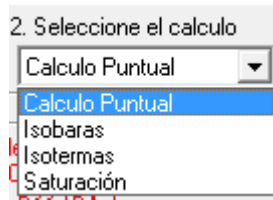
- Metano

- Etileno
- Etano
- Propileno
- Propano
- i-Butano
- n-Butano
- i-Pentano
- n-Pentano
- Hexano
- Heptano
- Octano
- Nitrógeno
- Dióxido de Carbono
- Sulfuro de Hidrogeno



El tipo de cálculo de las 4 opciones del combo 2. " Seleccione el cálculo":

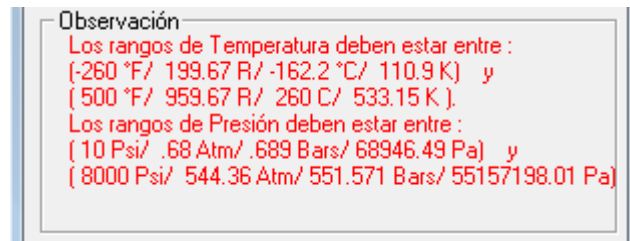
- Cálculo puntual
- Isobaras
- Isotermas
- Saturación



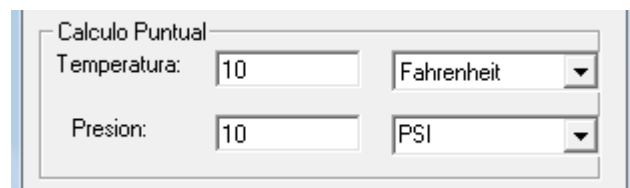
Al seleccionar la sustancia en el área llamada “Observación” se visualiza los rangos de temperatura y presión de operación en cuatro diferente unidades de medición respectivamente:

Temperatura: Fahrenheit (°F), Rankin (R), Celsius (°C) y Kelvin (K)

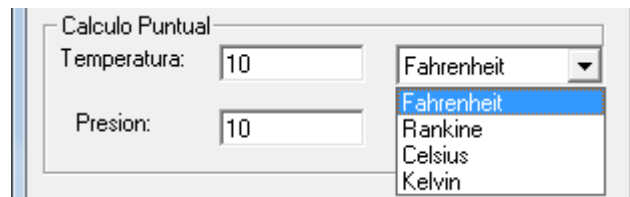
Presión: Libra- Fuerza por pulgadas cuadradas (Psi), Atmosfera (Atm), Bares (Bars) y Pascales (Pa)



A. Si el cálculo seleccionado fue “Cálculo Puntual” se habilita el cuadro para el ingreso de los datos de temperatura y presión a los cuales desea realizar el cálculo:



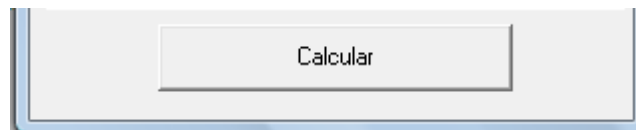
Se selecciona las unidades de medición:



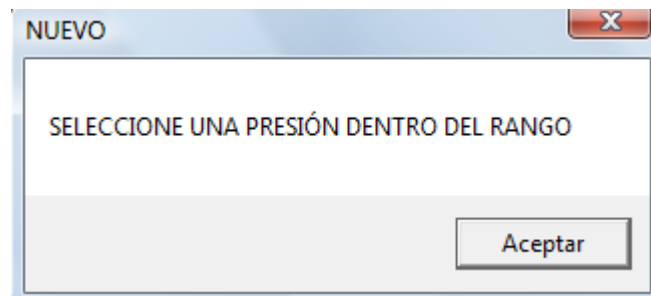
Calculo Puntual
Temperatura: 10 Fahrenheit
Presion: 10 PSI
Liquido
Densidad Molar (lbmol/ft3)

PSI
Atmosferas
Bars
Pascal

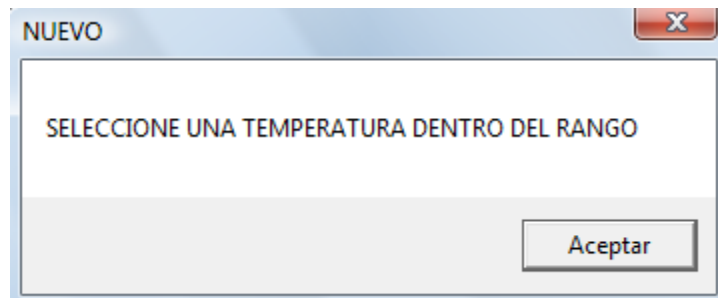
Luego se da click en el botón calcular:



Si el dato de presión está por fuera del rango de operación aparece el siguiente mensaje:



Si el dato de temperatura está por fuera del rango de operación aparece el siguiente mensaje:



Pero si los datos de presión y temperatura de entrada están en el rango de operaciones, se puede visualizar las propiedades termodinámicas:

Propiedades	
Densidad Molar (lbmol/ft ³)	0.247018
Volumen Especifico (ft ³ /lbm)	0.252356
Entalpia (Btu/lbm)	-1601.604163
Energía Interna (Btu/lbm)	-1853.959963
Entropia (Btu/lbm * R)	2.116520
Fugacidad (1/Psia)	0.819859

B. Si el cálculo seleccionado fue “Isobaras” se habilita el cuadro para el ingreso de los datos de presión e incremento con los cuales desea realizar el cálculo:

Isobaras		
Presión:	1000	PSI
Incremento de Temperatura:	10	

Se selecciona las unidades de medición:

Isobaras		
Presión:	1000	PSI
Incremento de Temperatura:	10	

- PSI
- Atmosferas
- Bars
- Pascal

Se verifica que el dato de presión se encuentre en el rango de operación y se da click en “Calcular”:

Calcular

Se abre la siguiente ventana donde nos muestra una tabla con las propiedades termodinámicas según las variaciones de temperatura de acuerdo al incremento y los rangos preestablecidos de la sustancia.

Propiedades Termodinámicas													
Tablas Graficas Exportar Salir													
T (F)	DI (lbmol / ft3)	Dv (lbmol / ft3)	VI (ft3 / lbm)	Vv (ft3 / lbm)	UI (btu / lbm)	Uv (btu / lbm)	HI (btu / lbm)	Hv (btu / lbm)	SI (btu / lbm * R)	Sv (btu / lbm * R)	f/P (1/psi)	fv/P (1/psi)	
-260.0	1.677964	1.677964	0.037150	0.037150	-1949.7240	-1949.7240	-1912.5740	-1912.5740	1.163330	1.163330	0.017984	0.017984	
-250.0	1.645093	1.645093	0.037892	0.037892	-1942.1300	-1942.1300	-1904.2380	-1904.2380	1.204063	1.204063	0.027130	0.027130	
-240.0	1.612380	1.612380	0.038661	0.038661	-1934.4300	-1934.4300	-1895.7690	-1895.7690	1.243520	1.243520	0.039380	0.039380	
-230.0	1.579583	1.579583	0.039464	0.039464	-1926.6970	-1926.6970	-1887.2330	-1887.2330	1.281516	1.281516	0.055017	0.055017	
-220.0	1.546448	1.546448	0.040309	0.040309	-1918.9710	-1918.9710	-1878.6620	-1878.6620	1.318046	1.318046	0.074347	0.074347	
-210.0	1.512702	1.512702	0.041209	0.041209	-1911.2680	-1911.2680	-1870.0590	-1870.0590	1.353212	1.353212	0.097588	0.097588	
-200.0	1.478039	1.478039	0.042175	0.042175	-1903.5840	-1903.5840	-1861.4090	-1861.4090	1.387180	1.387180	0.124855	0.124855	
-190.0	1.442101	1.442101	0.043226	0.043226	-1895.9090	-1895.9090	-1852.6830	-1852.6830	1.420153	1.420153	0.156165	0.156165	
-180.0	1.404451	1.404451	0.044385	0.044385	-1888.2200	-1888.2200	-1843.8350	-1843.8350	1.452369	1.452369	0.191426	0.191426	
-170.0	1.364533	1.364533	0.045683	0.045683	-1880.4850	-1880.4850	-1834.8020	-1834.8020	1.484101	1.484101	0.230444	0.230444	
-160.0	1.321599	1.321599	0.047167	0.047167	-1872.6660	-1872.6660	-1825.4990	-1825.4990	1.515672	1.515672	0.272920	0.272920	
-150.0	1.274590	1.274590	0.048907	0.048907	-1864.7110	-1864.7110	-1815.8040	-1815.8040	1.547492	1.547492	0.318441	0.318441	
-140.0	1.221907	1.221907	0.051016	0.051016	-1856.5520	-1856.5520	-1805.5360	-1805.5360	1.580120	1.580120	0.366475	0.366475	
-130.0	1.160942	1.160942	0.053695	0.053695	-1848.0960	-1848.0960	-1794.4020	-1794.4020	1.614408	1.614408	0.416340	0.416340	
-120.0	1.087009	1.087009	0.057347	0.057347	-1839.2220	-1839.2220	-1781.8750	-1781.8750	1.651827	1.651827	0.467144	0.467144	
-110.0	0.990667	0.990667	0.062924	0.062924	-1829.8060	-1829.8060	-1766.8820	-1766.8820	1.695307	1.695307	0.517644	0.517644	
-100.0	0.852362	0.852362	0.073134	0.073134	-1820.1690	-1820.1690	-1747.0360	-1747.0360	1.751224	1.751224	0.565901	0.565901	
-90.0	0.664691	0.664691	0.093782	0.093782	-1813.9880	-1813.9880	-1720.2060	-1720.2060	1.824769	1.824769	0.608813	0.608813	
-80.0	0.517570	0.517570	0.120441	0.120441	-1815.9250	-1815.9250	-1695.4840	-1695.4840	1.890802	1.890802	0.644299	0.644299	
-70.0	0.435696	0.435696	0.143073	0.143073	-1820.9480	-1820.9480	-1677.8750	-1677.8750	1.936613	1.936613	0.673959	0.673959	
-60.0	0.385263	0.385263	0.161802	0.161802	-1826.1200	-1826.1200	-1664.3180	-1664.3180	1.970981	1.970981	0.699631	0.699631	
-50.0	0.350146	0.350146	0.178029	0.178029	-1830.9640	-1830.9640	-1652.9340	-1652.9340	1.999122	1.999122	0.722336	0.722336	
-40.0	0.323673	0.323673	0.192591	0.192591	-1835.4510	-1835.4510	-1642.8610	-1642.8610	2.023421	2.023421	0.742677	0.742677	
-30.0	0.302648	0.302648	0.205970	0.205970	-1839.6240	-1839.6240	-1633.6540	-1633.6540	2.045104	2.045104	0.761056	0.761056	
-20.0	0.285336	0.285336	0.218467	0.218467	-1843.5270	-1843.5270	-1625.0600	-1625.0600	2.064879	2.064879	0.777762	0.777762	
-10.0	0.270700	0.270700	0.230278	0.230278	-1847.1980	-1847.1980	-1616.9200	-1616.9200	2.083188	2.083188	0.793019	0.793019	
0	0.258077	0.258077	0.241542	0.241542	-1850.6670	-1850.6670	-1609.1260	-1609.1260	2.100332	2.100332	0.807003	0.807003	
10.0	0.247018	0.247018	0.252356	0.252356	-1853.9600	-1853.9600	-1601.6040	-1601.6040	2.116520	2.116520	0.819859	0.819859	
20.0	0.237205	0.237205	0.262795	0.262795	-1857.0950	-1857.0950	-1594.3000	-1594.3000	2.131910	2.131910	0.831711	0.831711	
30.0	0.228408	0.228408	0.272917	0.272917	-1860.0880	-1860.0880	-1587.1720	-1587.1720	2.146619	2.146619	0.842661	0.842661	
40.0	0.220453	0.220453	0.282765	0.282765	-1862.9520	-1862.9520	-1580.1870	-1580.1870	2.160739	2.160739	0.852799	0.852799	
50.0	0.213206	0.213206	0.292377	0.292377	-1865.6980	-1865.6980	-1573.3210	-1573.3210	2.174344	2.174344	0.862203	0.862203	
60.0	0.206562	0.206562	0.301781	0.301781	-1868.3340	-1868.3340	-1566.5530	-1566.5530	2.187495	2.187495	0.870940	0.870940	
70.0	0.200437	0.200437	0.311002	0.311002	-1870.8680	-1870.8680	-1559.8660	-1559.8660	2.200241	2.200241	0.879071	0.879071	
80.0	0.194765	0.194765	0.320060	0.320060	-1873.3060	-1873.3060	-1553.2460	-1553.2460	2.212623	2.212623	0.886649	0.886649	
90.0	0.189489	0.189489	0.328972	0.328972	-1875.6530	-1875.6530	-1546.6810	-1546.6810	2.224677	2.224677	0.893721	0.893721	
100.0	0.184563	0.184563	0.337752	0.337752	-1877.9130	-1877.9130	-1540.1610	-1540.1610	2.236433	2.236433	0.900329	0.900329	
110.0	0.179948	0.179948	0.346414	0.346414	-1880.0910	-1880.0910	-1533.6770	-1533.6770	2.247916	2.247916	0.906512	0.906512	
120.0	0.175611	0.175611	0.354968	0.354968	-1882.1890	-1882.1890	-1527.2210	-1527.2210	2.259149	2.259149	0.912303	0.912303	

Las propiedades que muestra la tabla son:

T(°F)= Temperatura en fahrenheit

DI (lbmol / ft3) = Densidad molar líquido (lbmol/ft3)

Dv (lbmol / ft3) = Densidad molar vapor (lbmol/ft3)

VI (ft3 / lbm) = Volumen específico líquido (ft3/lbm)

Vv (ft3 / lbm) = Volumen específico vapor (ft3/lbm)

UI (btu / lbm) = Energía interna líquido (Btu/lbm)

Uv (btu / lbm) = Energía interna vapor (Btu/lbm)

HI (btu / lbm) = Entalpía líquido (Btu/lbm)

Hv (btu / lbm) = Entalpía vapor (Btu/lbm)

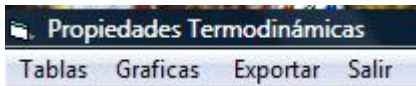
SI (btu / lbm * R) = Entropía líquido (Btu/lbm * R)

S_v (btu / lbm * R) = Entropía vapor (Btu/lbm * R)

f_l/P (1/psi) = Fugacidad líquido (1/Psia)

f_v/P (1/psi) = Fugacidad vapor (1/Psia)

El menú ofrece cuatro opciones:

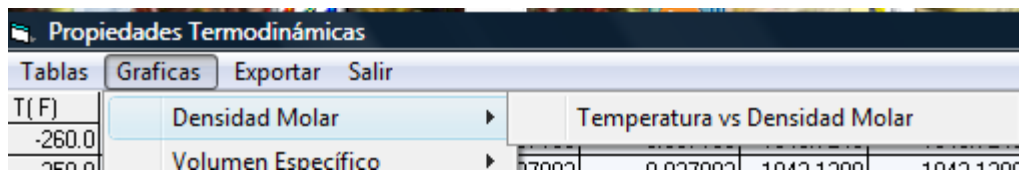


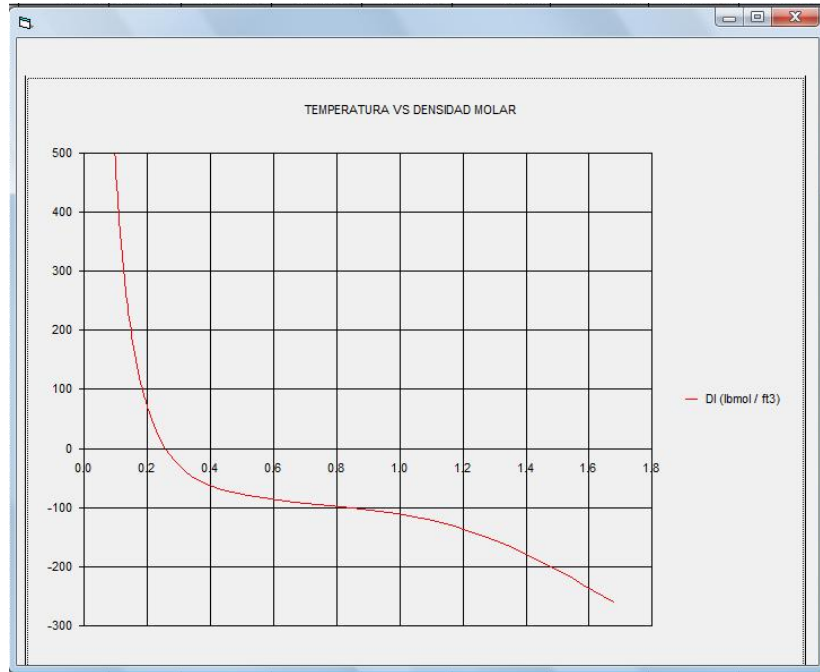
El menú **Tablas** me permite visualizar la tabla de propiedades termodinámicas.

El menú **Gráficas** despliega las siguientes opciones:



Al seleccionar alguna de las seis opciones de gráficas me despliega:



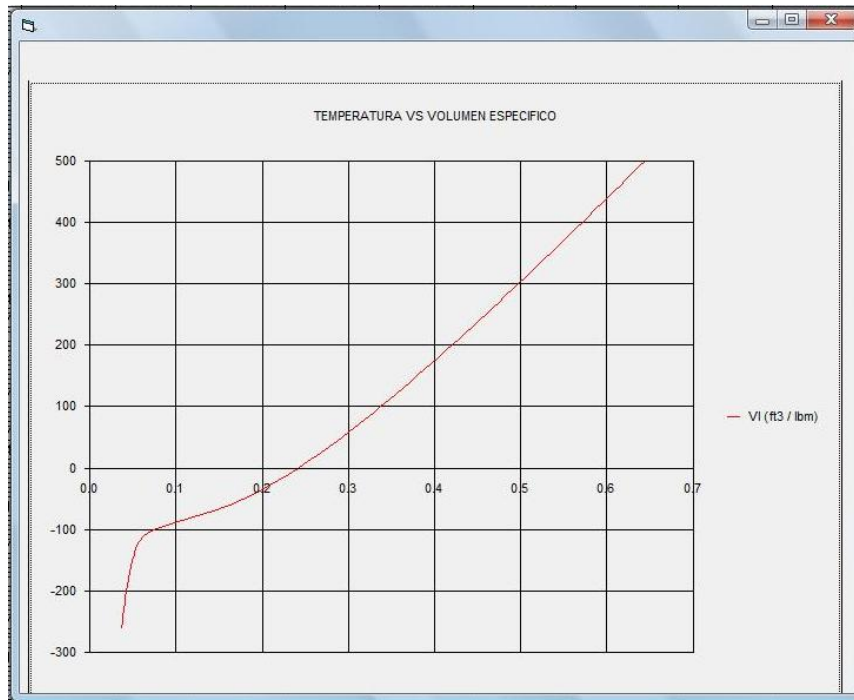


Propiedades Termodinámicas

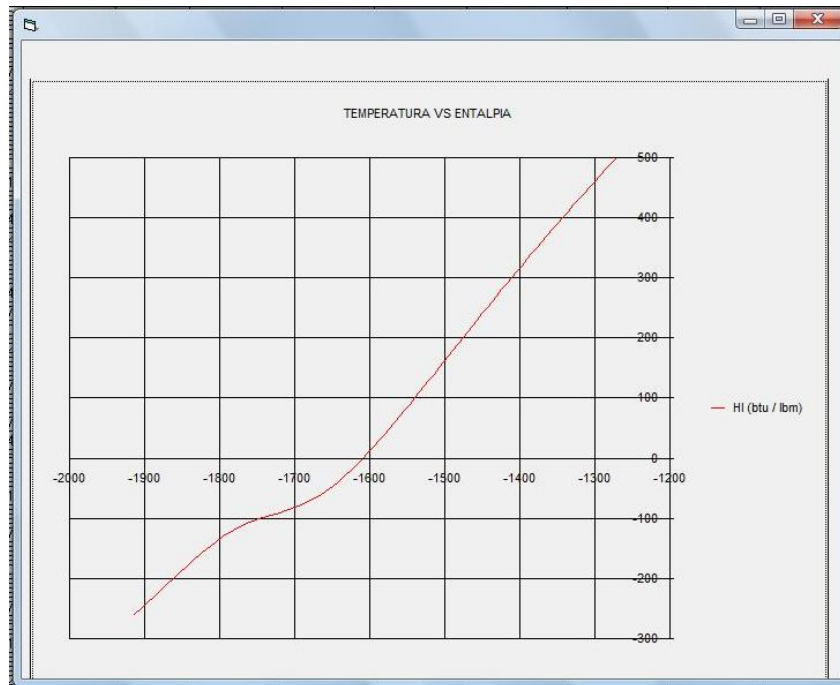
Tablas Graficas Exportar Salir

T (F)	Densidad Molar	Vv (ft ³ / lbm)	U (btu / lbm)	Uv (btu / lbm)	HI (
-260.0		5.3155	0.003155	4.010.7010	4.010.7010
-250.0	Volumen Especifico				

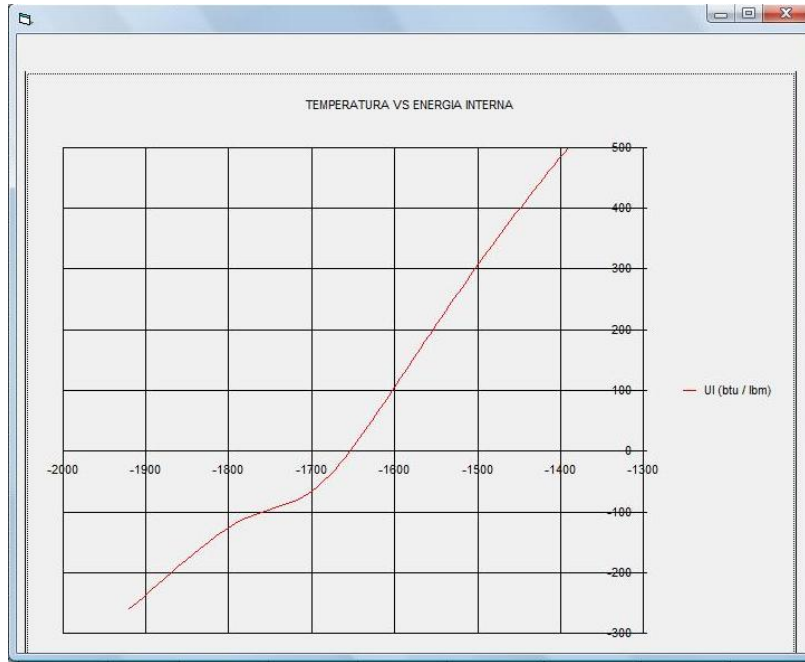
Temperatura vs Volumen Especifico



Propiedades Termodinámicas						
Tablas		Graficas	Exportar	Salir		
T (F)		Densidad Molar	m	Vv (ft3 / lbm)	Uf (btu / lbm)	Uv (btu / lbm)
-260.0			0.037150	0.037150	-1949.7240	-1949.7240
-250.0		Volumen Especifico	0.037892	0.037892	-1942.1300	-1942.1300
-240.0		Entalpía				
-230.0						
					Temperatura vs Entalpía	



Propiedades Termodinámicas						
Tablas		Graficas	Exportar	Salir		
T (F)		Densidad Molar	m	Vv (ft3 / lbm)	Uf (btu / lbm)	Uv (btu / lbm)
-260.0			0.037150	0.037150	-1949.7240	-1949.7240
-250.0		Volumen Especifico	0.037892	0.037892	-1942.1300	-1942.1300
-240.0		Entalpía				
-230.0		Energía Interna				
-220.0						
					Temperatura vs Energía Interna	

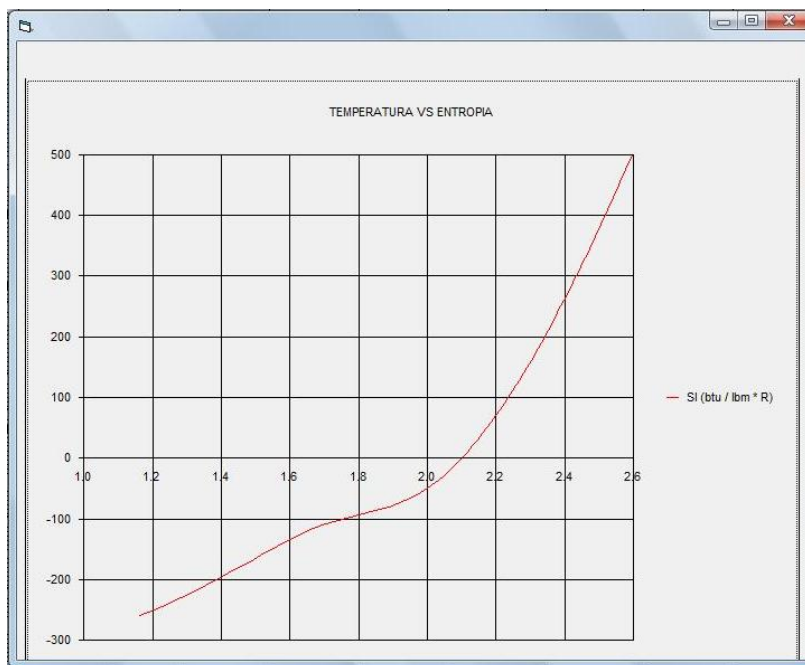


Propiedades Termodinámicas

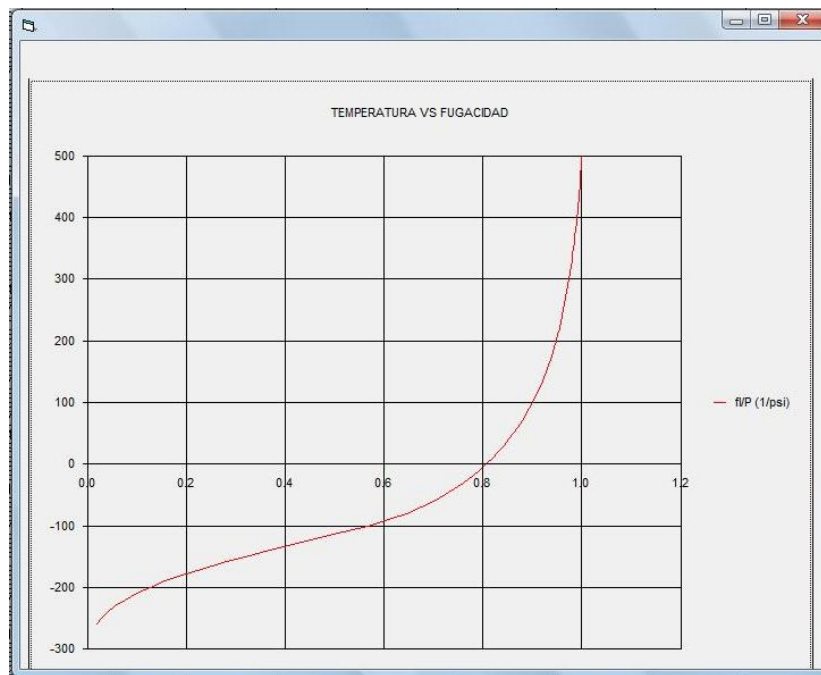
Tablas Graficas Exportar Salir

T (F)	Densidad Molar	m	Vv (ft3 / lbm)	UI (btu / lbm)	Uv (btu
-260.0	Densidad Molar	0.037150	0.037150	-1949.7240	-19
-250.0	Volumen Específico	0.037892	0.037892	-1942.1300	-19
-240.0	Entalpía	0.038661	0.038661	-1934.4300	-19
-230.0	Energía Interna	0.039464	0.039464	-1926.6970	-19
-220.0					
-210.0	Entropía				

Temperatura vs Entropía



Propiedades Termodinámicas						
		Tablas	Graficas	Exportar	Salir	
T (F)	Densidad Molar	m	Vv (ft3 / lbm)	Uf (btu / lbm)	Uv (btu / l	
-260.0		37150	0.037150	-1949.7240	-1949	
-250.0	Volumen Específico	37892	0.037892	-1942.1300	-1942	
-240.0	Entalpía	38661	0.038661	-1934.4300	-1934	
-230.0	Energía Interna	39464	0.039464	-1926.6970	-1926	
-220.0	Entropía	40309	0.040309	-1918.9710	-1918	
-210.0	Entropía	41209	0.041209	-1911.2680	-1911	
-200.0	Fugacidad	Temperatura vs Fugacidad				
-190.0						



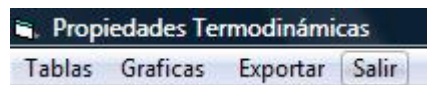
El menú **Exportar** me permite exportar la tabla de datos a Excel:

Propiedades Termodinámicas					
		Tablas	Graficas	Exportar	Salir
T (F)	DI (lbmol / ft	Excel			
-260.0	1.677				

Al dar click en Excel se abre una hoja de cálculo así:

T (F)	Dv (lbmol / ft3)	Dv (lbmol / ft3)	Vv (ft3 / lbm)	Vv (ft3 / lbm)	Uv (btu / lbm)	Uv (btu / lbm)	Hl (btu / lbm)	Hl (btu / lbm)	Sl (btu / lbm * R)	Sv (btu / lbm * R) fi/P
-260	1.677964	1.677964	0.03715	0.03715	-1949.724	-1949.724	-1912.574	-1912.574	1.16333	1.16333
-250	1.645093	1.645093	0.037892	0.037892	-1942.13	-1942.13	-1904.238	-1904.238	1.204063	1.204063
-240	1.61238	1.61238	0.038661	0.038661	-1934.43	-1934.43	-1895.769	-1895.769	1.24352	1.24352
-230	1.579583	1.579583	0.039464	0.039464	-1926.697	-1926.697	-1887.233	-1887.233	1.281516	1.281516
-220	1.546448	1.546448	0.040309	0.040309	-1918.971	-1918.971	-1878.662	-1878.662	1.318046	1.318046
-210	1.512702	1.512702	0.041209	0.041209	-1911.268	-1911.268	-1870.059	-1870.059	1.353212	1.353212
-200	1.478039	1.478039	0.042175	0.042175	-1903.584	-1903.584	-1861.409	-1861.409	1.38718	1.38718
-190	1.442101	1.442101	0.043226	0.043226	-1895.909	-1895.909	-1852.683	-1852.683	1.420153	1.420153
-180	1.404451	1.404451	0.044385	0.044385	-1888.22	-1888.22	-1843.835	-1843.835	1.452369	1.452369
-170	1.364533	1.364533	0.045683	0.045683	-1880.485	-1880.485	-1834.802	-1834.802	1.484101	1.484101
-160	1.321599	1.321599	0.047167	0.047167	-1872.666	-1872.666	-1825.499	-1825.499	1.515672	1.515672
-150	1.27459	1.27459	0.048907	0.048907	-1864.711	-1864.711	-1815.804	-1815.804	1.547492	1.547492
-140	1.221907	1.221907	0.051016	0.051016	-1856.552	-1856.552	-1805.536	-1805.536	1.58012	1.58012
-130	1.160942	1.160942	0.053695	0.053695	-1848.096	-1848.096	-1794.402	-1794.402	1.614408	1.614408
-120	1.087009	1.087009	0.057347	0.057347	-1839.222	-1839.222	-1781.875	-1781.875	1.651827	1.651827
-110	0.990667	0.990667	0.062924	0.062924	-1829.806	-1829.806	-1766.882	-1766.882	1.695307	1.695307
-100	0.852362	0.852362	0.073134	0.073134	-1820.169	-1820.169	-1747.036	-1747.036	1.751224	1.751224
-90	0.664691	0.664691	0.093782	0.093782	-1813.988	-1813.988	-1720.206	-1720.206	1.824769	1.824769
-80	0.51757	0.51757	0.120441	0.120441	-1815.925	-1815.925	-1695.484	-1695.484	1.890802	1.890802
-70	0.435696	0.435696	0.143073	0.143073	-1820.948	-1820.948	-1677.875	-1677.875	1.936613	1.936613

Y por último el menú **Salir** que cierra la ventana propiedades termodinámicas.



C. Si el cálculo seleccionado fue "Isotermas" se habilita el cuadro para el ingreso de los datos de presión e incremento con los cuales desea realizar el cálculo:

Isotermas

Temperatura:

Incremento de Presión:

Se selecciona las unidades de medición:

Isotermas

Temperatura:

Incremento de Presión:

Fahrenheit
Rankine
Celsius
Kelvin

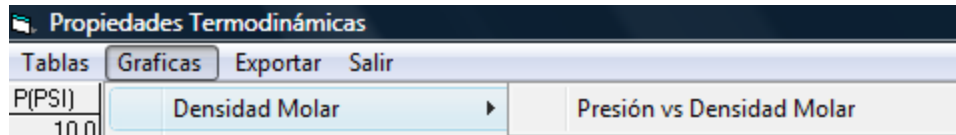
Se verifica que el dato de temperatura se encuentre en el rango de operación y damos click en “Calcular”:

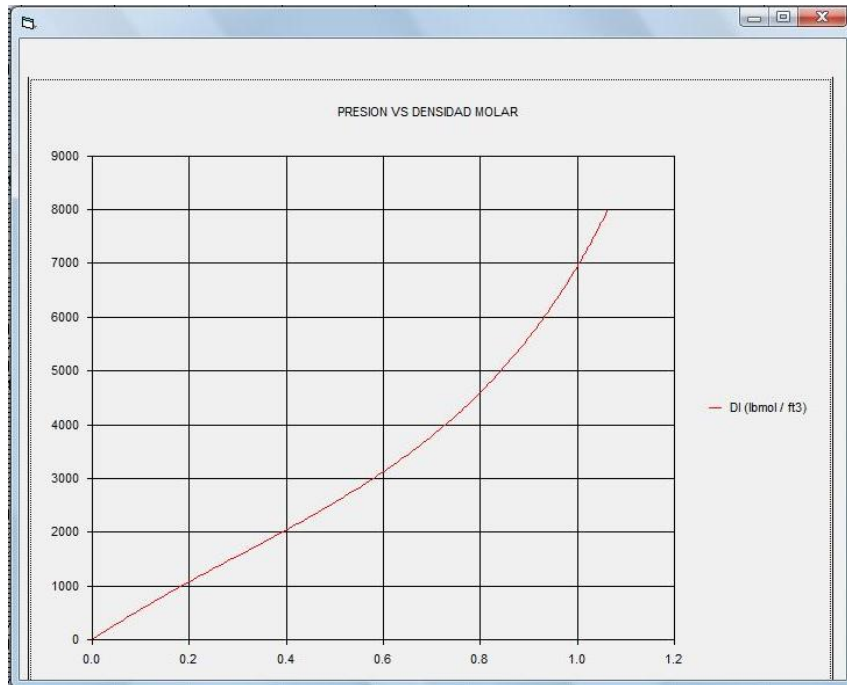
Calcular

Se abre la siguiente ventana donde nos muestra una tabla con las propiedades termodinámicas según las variaciones de presión de acuerdo al incremento y los rangos preestablecidos de la sustancia.

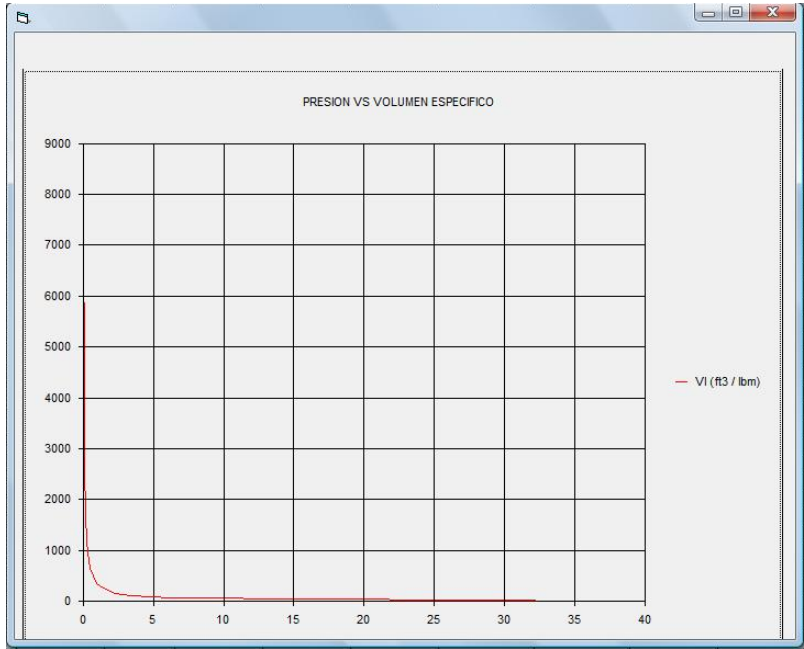
Propiedades Termodinámicas													
Tablas Gráficas Exportar Salir													
P(PSI)	Dl (lbmol / R3)	Dv (lbmol / R3)	Vi (ft3 / lbm)	Vv (ft3 / lbm)	Uf (btu / lbm)	Uv (btu / lbm)	Hf (btu / lbm)	Hv (btu / lbm)	Sl (btu / lbm * R)	Sv (btu / lbm * R)	f/P (1/psi)	fv/P (1/psi)	
10.0	0.001667	0.001667	37.400170	37.400400	-1886.9090	-1886.9110	-1512.9070	-1512.9070	2.842382	2.842383	0.998901	0.998895	
60.0	0.010056	0.010056	6.199126	6.199132	-1886.1900	-1886.1900	-1514.2420	-1514.2420	2.618860	2.618860	0.993416	0.993415	
110.0	0.018537	0.018537	3.362801	3.362802	-1885.4920	-1885.4920	-1515.5840	-1515.5840	2.542104	2.542104	0.987984	0.987984	
160.0	0.027111	0.027111	2.299284	2.299285	-1884.8170	-1884.8170	-1516.9310	-1516.9310	2.493985	2.493985	0.982603	0.982603	
210.0	0.035778	0.035778	1.742290	1.742290	-1884.1650	-1884.1650	-1518.2850	-1518.2850	2.458575	2.458575	0.977273	0.977273	
260.0	0.044539	0.044539	1.399598	1.399598	-1883.5390	-1883.5390	-1519.6440	-1519.6440	2.430377	2.430377	0.971995	0.971995	
310.0	0.053392	0.053392	1.167519	1.167519	-1882.9390	-1882.9390	-1521.0080	-1521.0080	2.406831	2.406831	0.966769	0.966769	
360.0	0.062338	0.062338	0.999967	0.999967	-1882.3660	-1882.3660	-1522.3780	-1522.3780	2.386536	2.386536	0.961596	0.961596	
410.0	0.071377	0.071377	0.873339	0.873339	-1881.8220	-1881.8220	-1523.7530	-1523.7530	2.368640	2.368640	0.956476	0.956476	
460.0	0.080507	0.080507	0.774293	0.774293	-1881.3060	-1881.3060	-1525.1310	-1525.1310	2.352588	2.352588	0.951411	0.951411	
510.0	0.089729	0.089729	0.694720	0.694720	-1880.8210	-1880.8210	-1526.5140	-1526.5140	2.337997	2.337997	0.946400	0.946400	
560.0	0.099040	0.099040	0.629406	0.629406	-1880.3680	-1880.3680	-1527.9000	-1527.9000	2.324592	2.324592	0.941445	0.941445	
610.0	0.108440	0.108440	0.574849	0.574849	-1879.9470	-1879.9470	-1529.2890	-1529.2890	2.312168	2.312168	0.936546	0.936546	
660.0	0.117926	0.117926	0.528605	0.528605	-1879.5600	-1879.5600	-1530.6810	-1530.6810	2.300571	2.300571	0.931703	0.931703	
710.0	0.127498	0.127498	0.488921	0.488921	-1879.2080	-1879.2080	-1532.0740	-1532.0740	2.289678	2.289678	0.926918	0.926918	
760.0	0.137153	0.137153	0.454504	0.454504	-1878.8920	-1878.8920	-1533.4690	-1533.4690	2.279394	2.279394	0.922190	0.922190	
810.0	0.146888	0.146888	0.424381	0.424381	-1878.6140	-1878.6140	-1534.8650	-1534.8650	2.269641	2.269641	0.917522	0.917522	
860.0	0.156700	0.156700	0.397806	0.397806	-1878.3730	-1878.3730	-1536.2600	-1536.2600	2.260356	2.260356	0.912913	0.912913	
910.0	0.166588	0.166588	0.374195	0.374195	-1878.1720	-1878.1720	-1537.6550	-1537.6550	2.251486	2.251486	0.908364	0.908364	
960.0	0.176547	0.176547	0.353087	0.353087	-1878.0120	-1878.0120	-1539.0480	-1539.0480	2.242988	2.242988	0.903876	0.903876	
1010.0	0.186573	0.186573	0.334113	0.334113	-1877.8920	-1877.8920	-1540.4390	-1540.4390	2.234825	2.234825	0.899449	0.899449	
1060.0	0.196663	0.196663	0.316971	0.316971	-1877.8160	-1877.8160	-1541.8270	-1541.8270	2.226966	2.226966	0.895084	0.895084	
1110.0	0.206812	0.206812	0.301416	0.301416	-1877.7820	-1877.7820	-1543.2110	-1543.2110	2.219383	2.219383	0.890783	0.890783	
1160.0	0.217015	0.217015	0.287244	0.287244	-1877.7930	-1877.7930	-1544.5900	-1544.5900	2.212055	2.212055	0.886545	0.886545	
1210.0	0.227268	0.227268	0.274285	0.274285	-1877.8490	-1877.8490	-1545.9630	-1545.9630	2.204961	2.204961	0.882371	0.882371	
1260.0	0.237566	0.237566	0.262397	0.262396	-1877.9500	-1877.9500	-1547.3300	-1547.3300	2.198083	2.198083	0.878261	0.878261	
1310.0	0.247902	0.247902	0.251456	0.251456	-1878.0970	-1878.0970	-1548.6900	-1548.6900	2.191408	2.191408	0.874217	0.874218	
1360.0	0.258271	0.258271	0.241361	0.241361	-1878.2910	-1878.2910	-1550.0410	-1550.0410	2.184921	2.184921	0.870239	0.870239	
1410.0	0.268667	0.268667	0.232021	0.232021	-1878.5330	-1878.5330	-1551.3830	-1551.3830	2.178611	2.178611	0.866328	0.866328	
1460.0	0.279084	0.279084	0.223361	0.223361	-1878.8220	-1878.8220	-1552.7150	-1552.7150	2.172468	2.172468	0.862483	0.862483	
1510.0	0.289515	0.289515	0.215313	0.215313	-1879.1580	-1879.1580	-1554.0350	-1554.0350	2.166483	2.166483	0.858706	0.858706	
1560.0	0.299954	0.299954	0.207820	0.207820	-1879.5430	-1879.5430	-1555.3440	-1555.3440	2.160648	2.160648	0.854997	0.854997	
1610.0	0.310395	0.310395	0.200829	0.200829	-1879.9750	-1879.9750	-1556.6400	-1556.6400	2.154955	2.154955	0.851355	0.851355	
1660.0	0.320831	0.320831	0.194297	0.194297	-1880.4550	-1880.4550	-1557.9220	-1557.9220	2.149399	2.149399	0.847782	0.847782	
1710.0	0.331255	0.331255	0.188183	0.188183	-1880.9820	-1880.9820	-1559.1900	-1559.1900	2.143973	2.143973	0.844278	0.844278	
1760.0	0.341660	0.341660	0.182451	0.182451	-1881.5560	-1881.5560	-1560.4420	-1560.4420	2.138672	2.138672	0.840843	0.840843	
1810.0	0.352041	0.352041	0.177071	0.177071	-1882.1770	-1882.1770	-1561.6780	-1561.6780	2.133491	2.133491	0.837477	0.837477	
1860.0	0.362391	0.362391	0.172014	0.172014	-1882.8450	-1882.8450	-1562.8980	-1562.8980	2.128427	2.128427	0.834180	0.834180	
1910.0	0.372703	0.372703	0.167255	0.167255	-1883.5570	-1883.5570	-1564.1000	-1564.1000	2.123474	2.123474	0.830953	0.830953	

El menú es parecido al que aparece en isobaras, son cuatro opciones, pero difiere en las seis opciones del menú **Gráficas**:





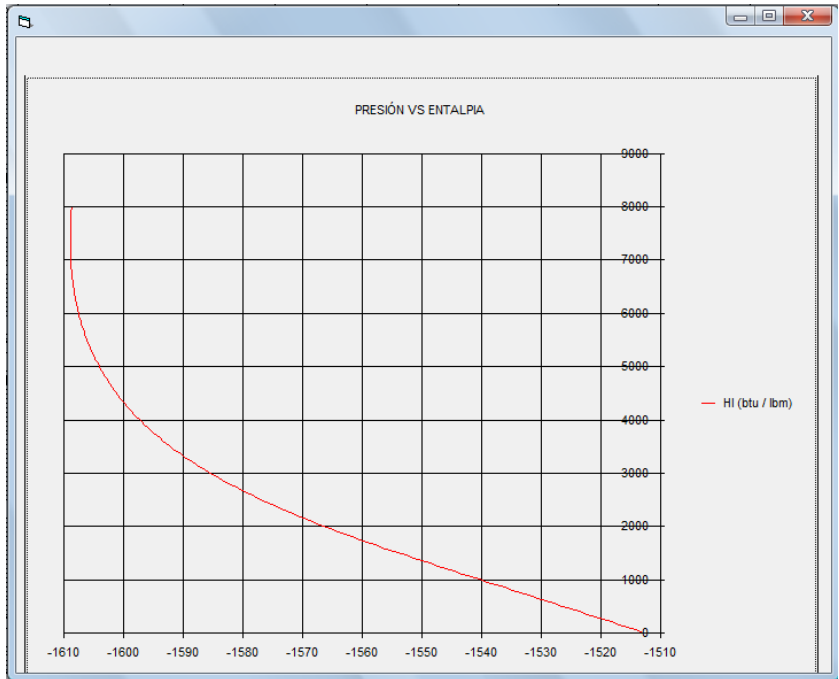
Propiedades Termodinámicas				
Tablas	Graficas	Exportar	Salir	
P(PSI)	Densidad Molar		m	Vv (ft3 / lbm)
10.0				U1 (btu / lbm)
60.0	Volumen Especifico			Uv (btu / lbm)
				Presión vs Volumen Especifico



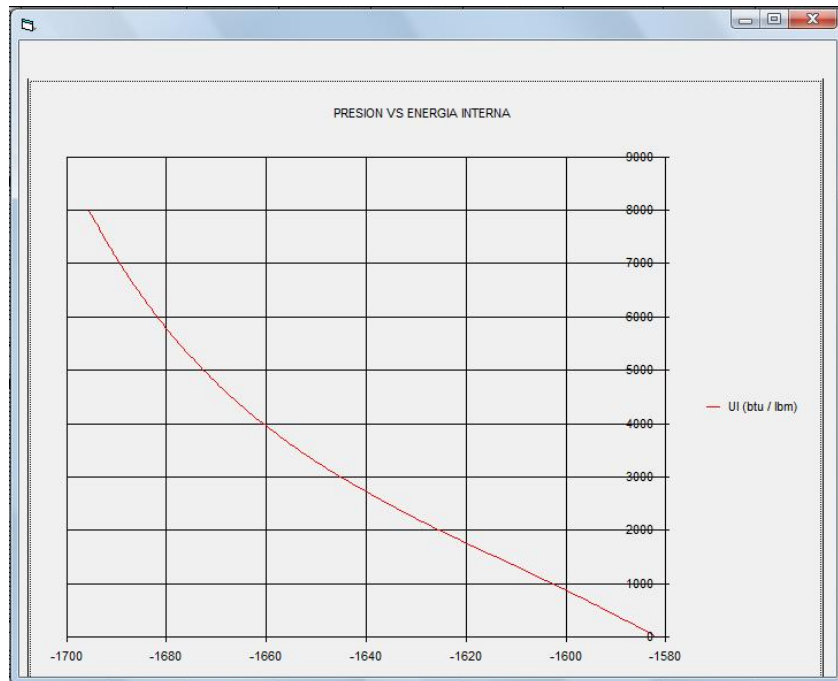
Propiedades Termodinámicas

Tablas Graficas Exportar Salir

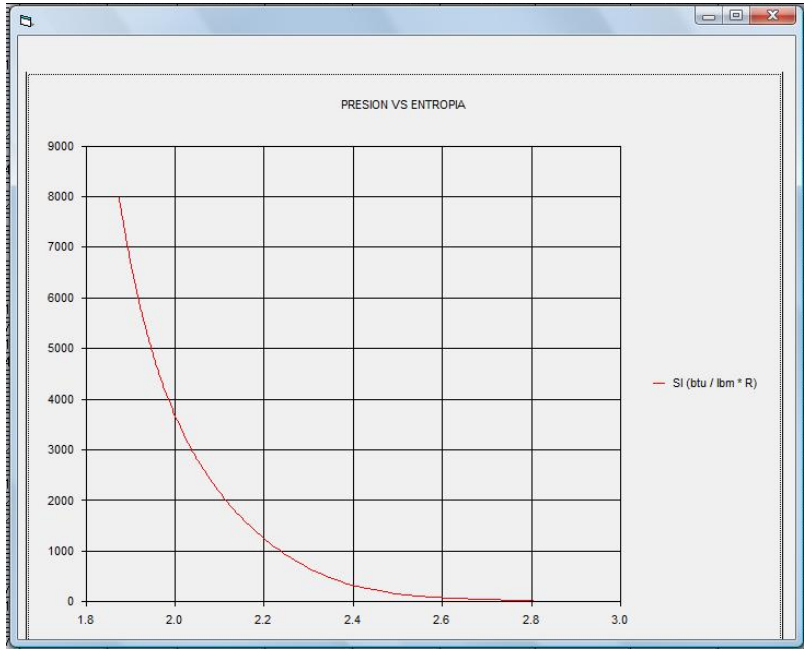
P(PSI)	Densidad Molar	m)	Vv (ft ³ / lbm)	Uf (btu / lbm)	L
10.0		00170	37.400400	-1886.9090	
60.0		00126	6.199132	-1886.1900	
110.0	Entalpía				Presión vs Entalpía
100.0					



Propiedades Termodinámicas						
Tablas Graficas Exportar Salir						
P(PSI)	Densidad Molar	▶	m	Vv (ft3 / lbm)	UI (btu / lbm)	Uv (btu /
10.0			00170	37.400400	-1886.9090	-1886
60.0	Volumen Especifico	▶	99126	6.199132	-1886.1900	-1886
110.0	Entalpía	▶	62801	3.362802	-1885.4920	-1885
160.0	Energía Interna	▶	Presión vs Energía Interna			
210.0						



Propiedades Termodinámicas						
Tablas Graficas Exportar Salir						
P(PSI)	Densidad Molar	▶	m	Vv (ft3 / lbm)	UI (btu / lbm)	U
10.0			00170	37.400400	-1886.9090	
60.0	Volumen Especifico	▶	99126	6.199132	-1886.1900	
110.0	Entalpía	▶	62801	3.362802	-1885.4920	
160.0	Energía Interna	▶	99284	2.299285	-1884.8170	
210.0			42200	1.742200	-1884.1420	
260.0	Entropía	▶	Presión vs Entropía			
310.0						

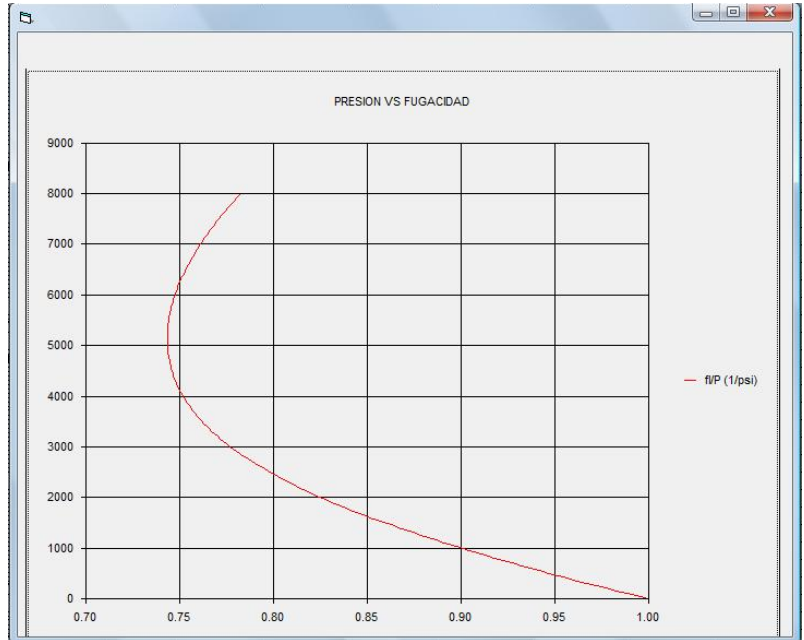


Propiedades Termodinámicas

Tablas Graficas Exportar Salir

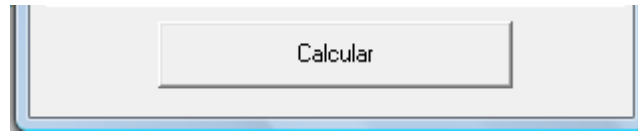
P(PsI)		m	Vv (ft3 / lbm)	Uf (btu / lbm)	Uv (
10.0	Densidad Molar	00170	37.400400	-1886.9090	
60.0	Volumen Específico	99126	6.199132	-1886.1900	
110.0	Entalpía	52801	3.362802	-1885.4920	
160.0	Energía Interna	99284	2.299285	-1884.8170	
210.0	Entropía	42290	1.742290	-1884.1650	
260.0	Fugacidad	99598	1.399598	-1883.5390	
310.0					
360.0					

Presión vs Fugacidad



Al igual que en isobaras seleccionamos la gráfica que deseamos visualizar y también podemos exportar los datos a Excel.

D. Si el cálculo seleccionado fue “Saturación” únicamente se da click el calcular:

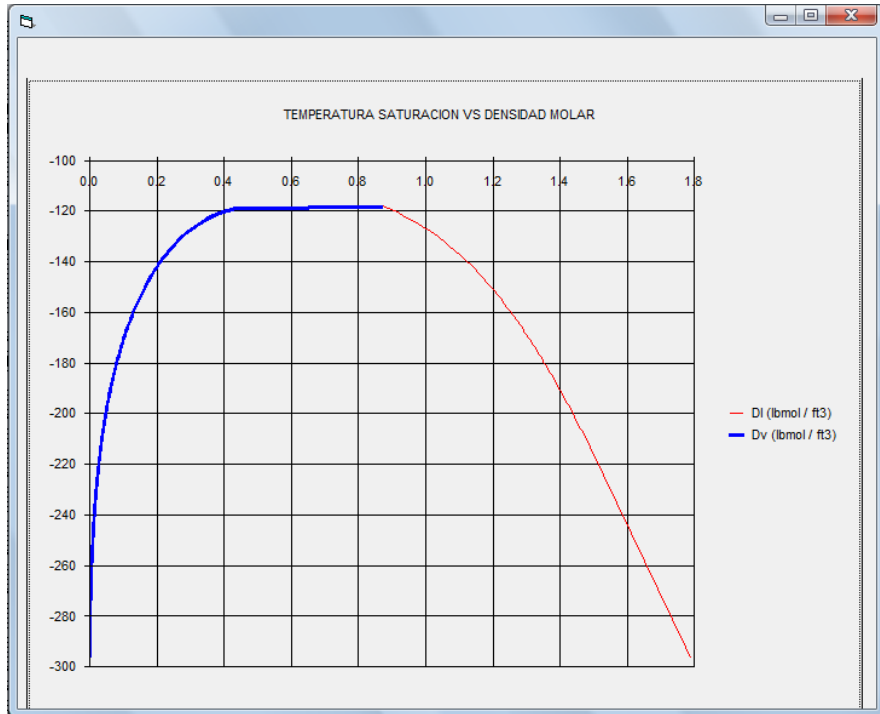
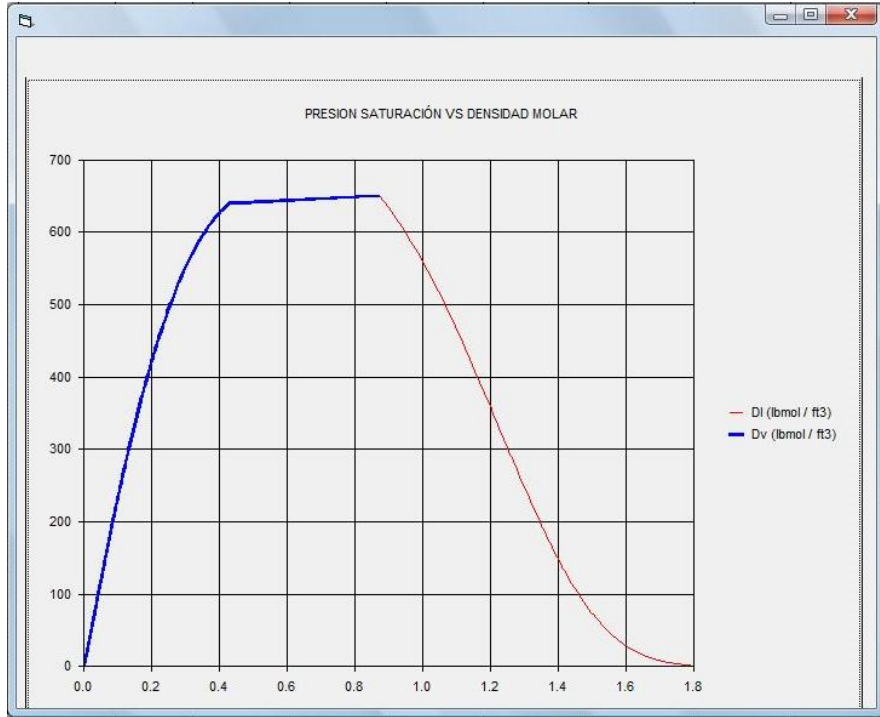


Se abre la siguiente ventana donde nos muestra una tabla con las propiedades termodinámicas de saturación de acuerdo a los rangos preestablecidos de presión y temperatura de saturación de la sustancia.

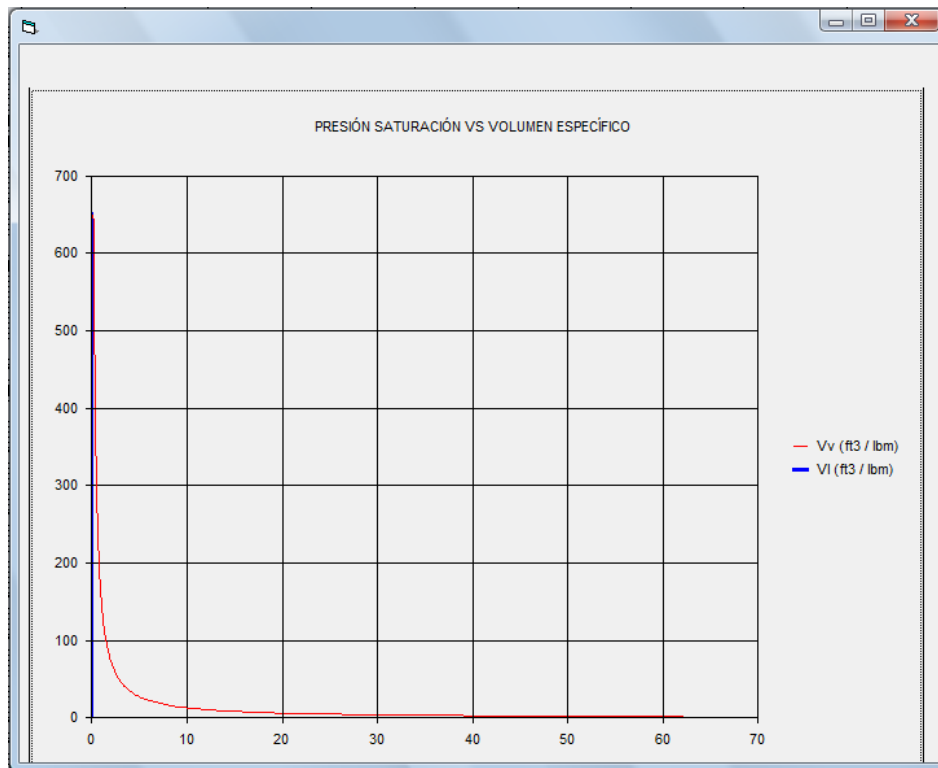
Propiedades Termodinámicas												
Tablas	Graficas	Exportar	Salir									
T (F)	P(PSI)	Dl (lbmol / ft3)	Dv (lbmol / ft3)	Vl (ft3 / lbm)	Vv (ft3 / lbm)	Uf (btu / lbm)	Uv (btu / lbm)	Hf (btu / lbm)	Hv (btu / lbm)	Sl (btu / lbm °F)	Sv (btu / lbm °F)	f/P (1/psi)
-296.67	1.67	1.791010	0.000960	0.034805	64.954010	-1943.1770	-1821.6660	-1943.1190	-1713.4570	1.032068	2.445323	1.027305
-295.67	1.79	1.787243	0.001025	0.034879	60.830210	-1942.6570	-1821.8180	-1942.5950	-1712.9910	1.035270	2.439417	1.025543
-294.67	1.92	1.783487	0.001093	0.034952	57.017750	-1942.1190	-1821.9680	-1942.0520	-1712.5260	1.038565	2.433602	1.023868
-293.67	2.06	1.779742	0.001165	0.035026	53.491080	-1941.5640	-1822.1190	-1941.4920	-1712.0630	1.041945	2.427880	1.022271
-292.67	2.2	1.776008	0.001241	0.035099	50.224690	-1940.9920	-1822.2680	-1940.9140	-1711.6020	1.045406	2.422245	1.020745
-291.67	2.36	1.772286	0.001321	0.035173	47.196630	-1940.4040	-1822.4160	-1940.3220	-1711.1410	1.048940	2.416697	1.019282
-290.67	2.52	1.768673	0.001404	0.035247	44.387420	-1939.8020	-1822.5630	-1939.7130	-1710.6830	1.052542	2.411234	1.017876
-289.67	2.69	1.764871	0.001492	0.035321	41.778450	-1939.1860	-1822.7080	-1939.0910	-1710.2260	1.056207	2.405853	1.016520
-288.67	2.87	1.761179	0.001584	0.035395	39.353770	-1938.5570	-1822.8530	-1938.4550	-1709.7700	1.059931	2.400554	1.015209
-287.67	3.06	1.757496	0.001680	0.035469	37.097920	-1937.9150	-1822.9970	-1937.8060	-1709.3170	1.063707	2.395334	1.013937
-286.67	3.27	1.753822	0.001781	0.035543	34.997620	-1937.2610	-1823.1390	-1937.1450	-1708.8650	1.067533	2.390191	1.012700
-285.67	3.48	1.750158	0.001887	0.035618	33.040420	-1936.5960	-1823.2800	-1936.4720	-1708.4140	1.071403	2.385123	1.011493
-284.67	3.7	1.746502	0.001997	0.035692	31.215320	-1935.9200	-1823.4200	-1935.7980	-1707.9650	1.075314	2.380131	1.010312
-283.67	3.93	1.742854	0.002112	0.035767	29.511690	-1935.2340	-1823.5590	-1935.0940	-1707.5180	1.079263	2.375210	1.009152
-282.67	4.18	1.739215	0.002233	0.035842	27.920470	-1934.5390	-1823.6960	-1934.3890	-1707.0730	1.083245	2.370361	1.008011
-281.67	4.43	1.735584	0.002358	0.035917	26.432870	-1933.8340	-1823.8320	-1933.6750	-1706.6300	1.087258	2.365581	1.006884
-280.67	4.7	1.731960	0.002489	0.035992	25.041320	-1933.1210	-1823.9670	-1932.9520	-1706.1890	1.091298	2.360869	1.005769
-279.67	4.99	1.728343	0.002626	0.036067	23.738410	-1932.4000	-1824.0990	-1932.2200	-1705.7490	1.095363	2.356223	1.004663
-278.67	5.28	1.724734	0.002768	0.036143	22.517760	-1931.6720	-1824.2310	-1931.4810	-1705.3120	1.099451	2.351643	1.003562
-277.67	5.59	1.721131	0.002917	0.036218	21.373320	-1930.9360	-1824.3610	-1930.7330	-1704.8760	1.103557	2.347126	1.002466
-276.67	5.91	1.717534	0.003071	0.036294	20.299520	-1930.1930	-1824.4900	-1929.9790	-1704.4430	1.107681	2.342672	1.001370
-275.67	6.25	1.713944	0.003231	0.036370	19.291300	-1929.4440	-1824.6170	-1929.2170	-1704.0110	1.111819	2.338279	1.000274
-274.67	6.6	1.710360	0.003398	0.036446	18.344100	-1928.6890	-1824.7430	-1928.4490	-1703.5820	1.115970	2.333945	0.999176
-273.67	6.97	1.706781	0.003572	0.036523	17.453490	-1927.9290	-1824.8660	-1927.6740	-1703.1550	1.120132	2.329669	0.998072
-272.67	7.36	1.703208	0.003752	0.036599	16.615630	-1927.1630	-1824.9890	-1926.8940	-1702.7290	1.124303	2.325451	0.996963
-271.67	7.76	1.699640	0.003939	0.036676	15.826880	-1926.3920	-1825.1090	-1926.1080	-1702.3060	1.128481	2.321290	0.995846
-270.67	8.18	1.696076	0.004133	0.036753	15.083840	-1925.6170	-1825.2280	-1925.3160	-1701.8860	1.132665	2.317182	0.994720
-269.67	8.61	1.692517	0.004334	0.036831	14.383430	-1924.8370	-1825.3450	-1924.5200	-1701.4670	1.136852	2.313128	0.993584
-268.67	9.07	1.688962	0.004543	0.036908	13.722830	-1924.0530	-1825.4610	-1923.7180	-1701.0510	1.141043	2.309127	0.992436
-267.67	9.54	1.685412	0.004759	0.036986	13.099370	-1923.2650	-1825.5740	-1922.9120	-1700.6370	1.145234	2.305177	0.991276
-266.67	10.03	1.681865	0.004983	0.037064	12.510610	-1922.4740	-1825.6860	-1922.1020	-1700.2250	1.149425	2.301278	0.990103
-265.67	10.54	1.678321	0.005215	0.037142	11.954290	-1921.6790	-1825.7950	-1921.2880	-1699.8160	1.153615	2.297427	0.988916
-264.67	11.07	1.674780	0.005455	0.037221	11.428320	-1920.8820	-1825.9030	-1920.4700	-1699.4090	1.157803	2.293625	0.987713
-263.67	11.62	1.671243	0.005703	0.037299	10.930780	-1920.0810	-1826.0090	-1919.6480	-1699.0050	1.161988	2.289871	0.986495
-262.67	12.19	1.667707	0.005960	0.037378	10.459860	-1919.2780	-1826.1130	-1918.8220	-1698.6030	1.166168	2.286162	0.985260
-261.67	12.78	1.664175	0.006225	0.037458	10.013870	-1918.4730	-1826.2150	-1917.9940	-1698.2030	1.170344	2.282499	0.984008
-260.67	13.4	1.660644	0.006499	0.037537	9.591272	-1917.6650	-1826.3150	-1917.1620	-1697.8070	1.174513	2.278879	0.982740
-259.67	14.04	1.657115	0.006783	0.037617	9.190630	-1916.8550	-1826.4130	-1916.3270	-1697.4120	1.178676	2.275303	0.981453
-258.67	14.7	1.653587	0.007075	0.037698	8.810607	-1916.0430	-1826.5090	-1915.4890	-1697.0200	1.182831	2.271770	0.980148

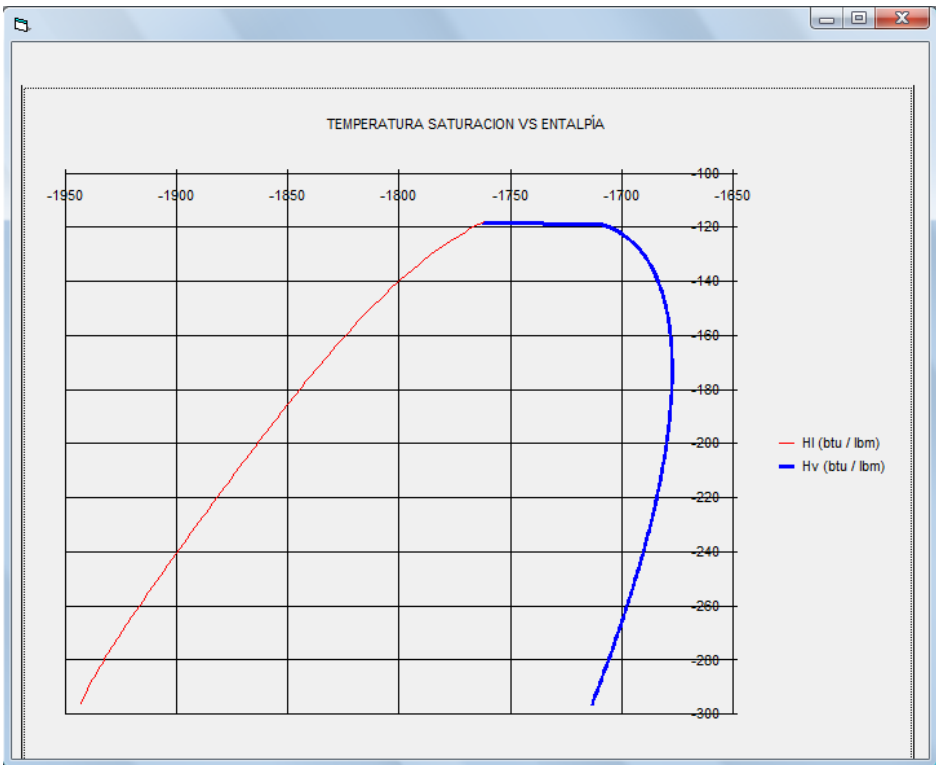
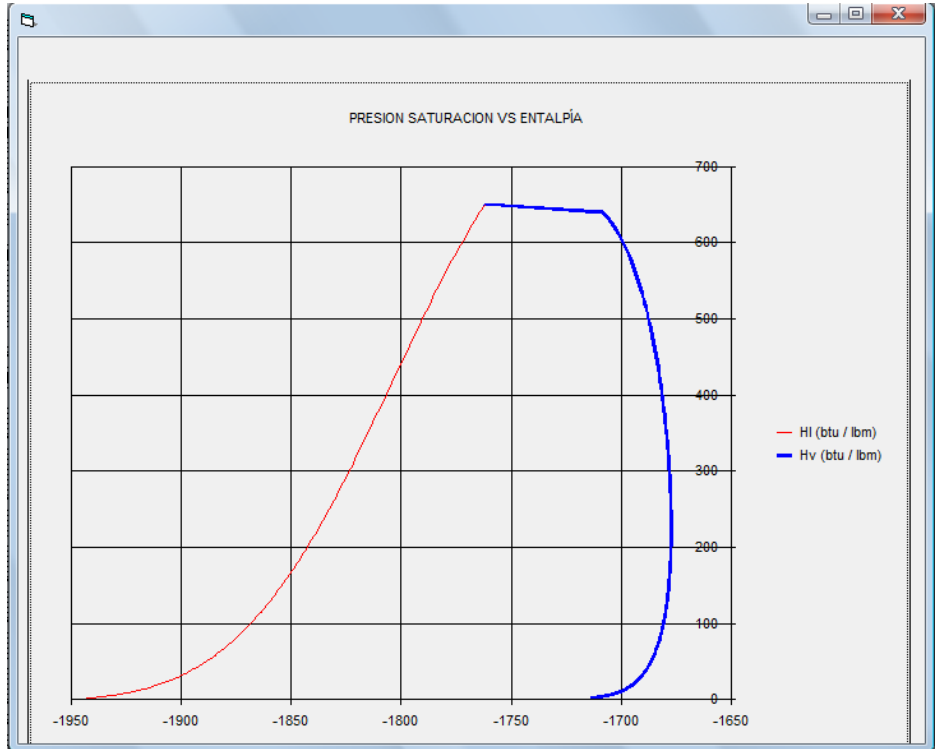
El menú es parecido al que aparece en isobaras e isotermas, son cuatro opciones, pero difiere en las siete opciones del menú “Gráficas”:

Propiedades Termodinámicas							
Tablas		Gráficas		Exportar		Salir	
T (F)		Densidad Molar	▶	Presión Saturación vs Densidad Molar			
-296.67		Volumen Especifico	▶	Temperatura Saturación vs Densidad Molar			
-295.67							

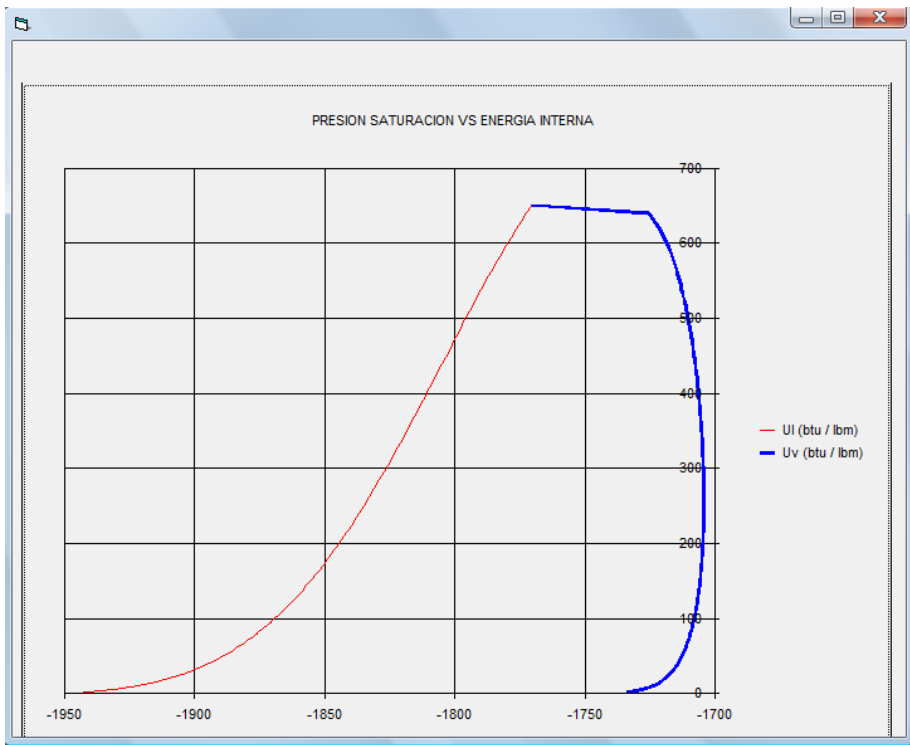


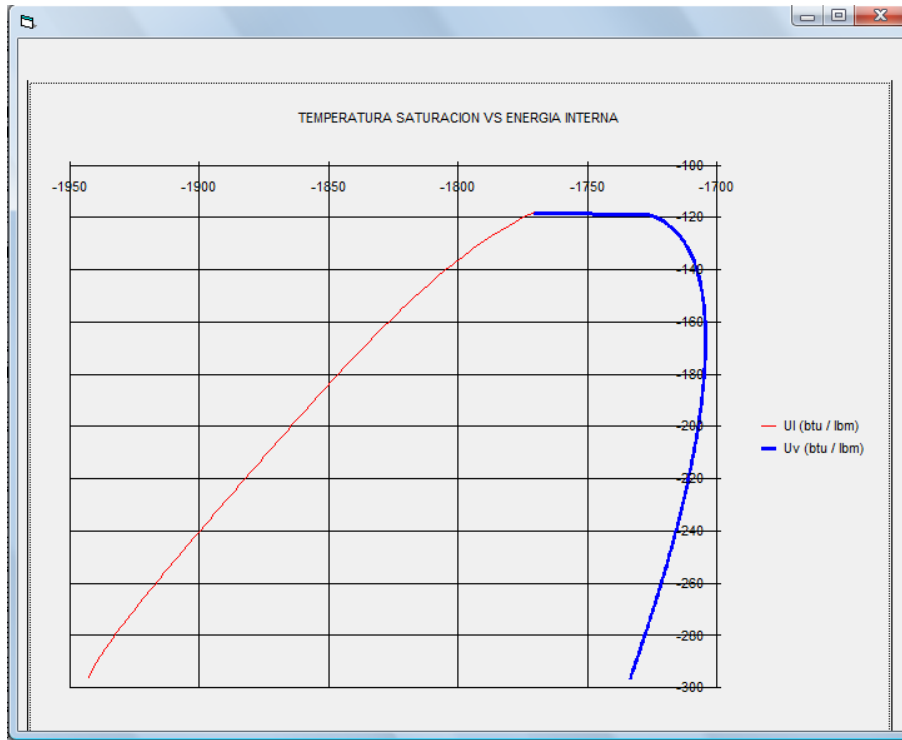
Propiedades Termodinámicas						
Tablas Graficas Exportar Salir						
T (F)		/ ft3)	VI (ft3 / lbm)	Vv (ft3 / lbm)	UI (btu / lbm)	Uv (btu / lbm)
-296.67	Densidad Molar					
-295.67	Volumen Específico					
-294.67	Entalpía					
-293.67						



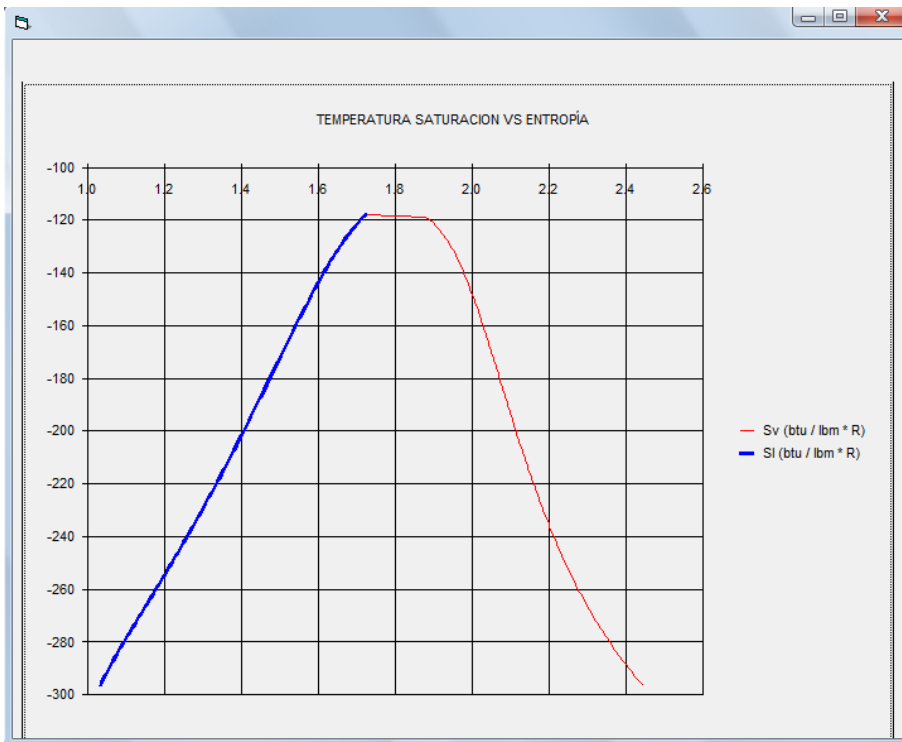
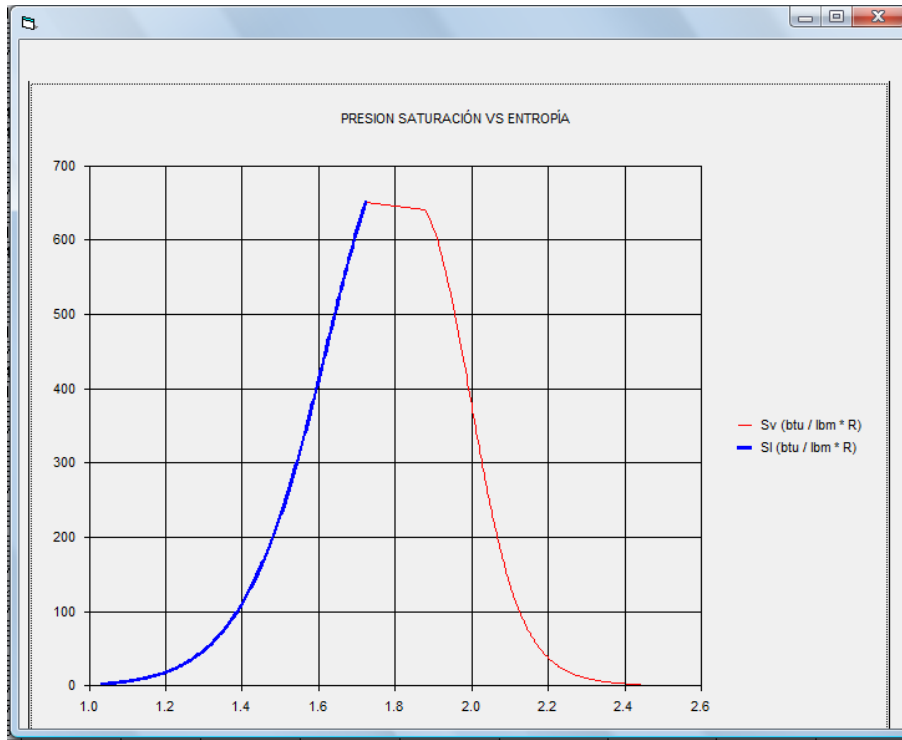


Propiedades Termodinámicas						
Tablas		Graficas		Exportar		Salir
T (F)	Densidad Molar	ρ (ft ³)	Vl (ft ³ / lbm)	Vv (ft ³ / lbm)	Ul (btu / lbm)	Uv (btu / lbm)
-296.67		0.0960	0.034805	64.954010	-1943.1770	-1821.1
-295.67	Volumen Específico		0.1025	0.034879	60.830210	-1942.6570
-294.67	Entalpía		0.1093	0.034952	57.017750	-1942.1190
-293.67	Energía Interna					
-292.67						
-291.67	Entropía					

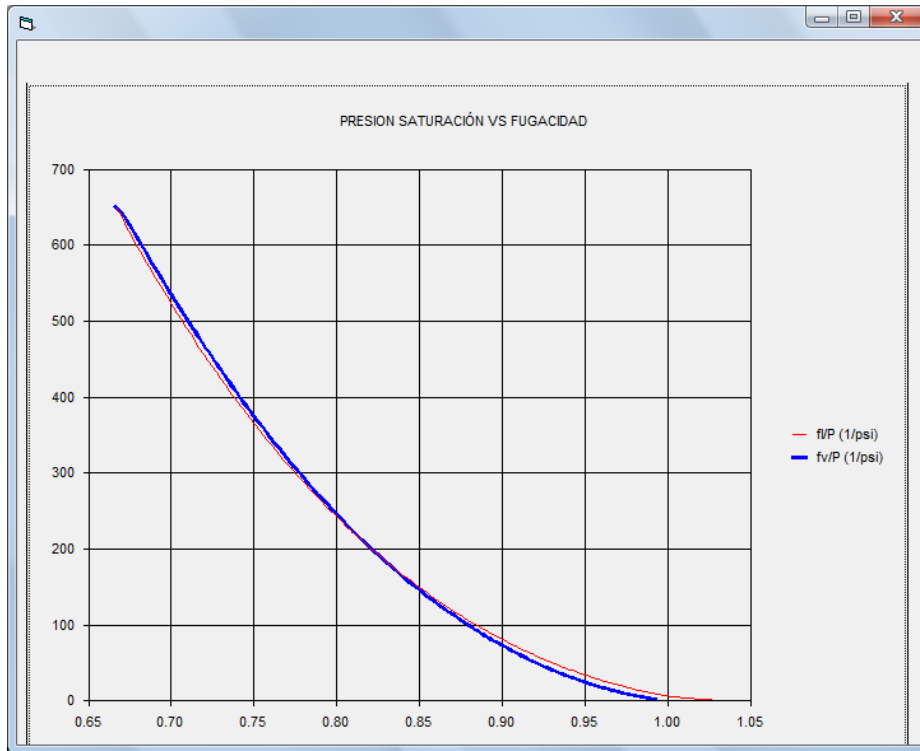


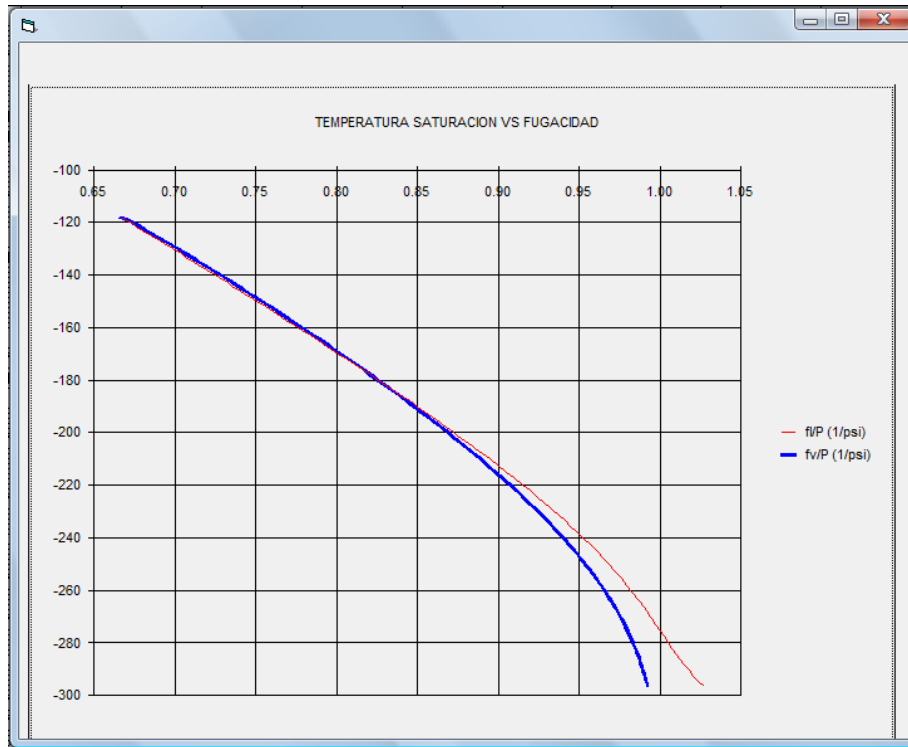


Propiedades Termodinámicas							
Tablas Graficas Exportar Salir							
T (F)			v (ft3)	VI (ft3 / lbm)	Vv (ft3 / lbm)	UI (btu / lbm)	Uv
-296.67	Densidad Molar	▶	00960	0.034805	64.954010	-1943.1770	
-295.67	Volumen Específico	▶	01025	0.034879	60.830210	-1942.6570	
-294.67	Entalpía	▶	01093	0.034952	57.017750	-1942.1190	
-293.67	Energía Interna	▶	01165	0.035026	53.491080	-1941.5640	
-292.67			01241	0.035099	50.224000	-1941.0090	
-291.67	Entropía	▶					Presión Saturación vs Entropía
-290.67	Fugacidad	▶					Temperatura Saturación vs Entropía
-289.67							

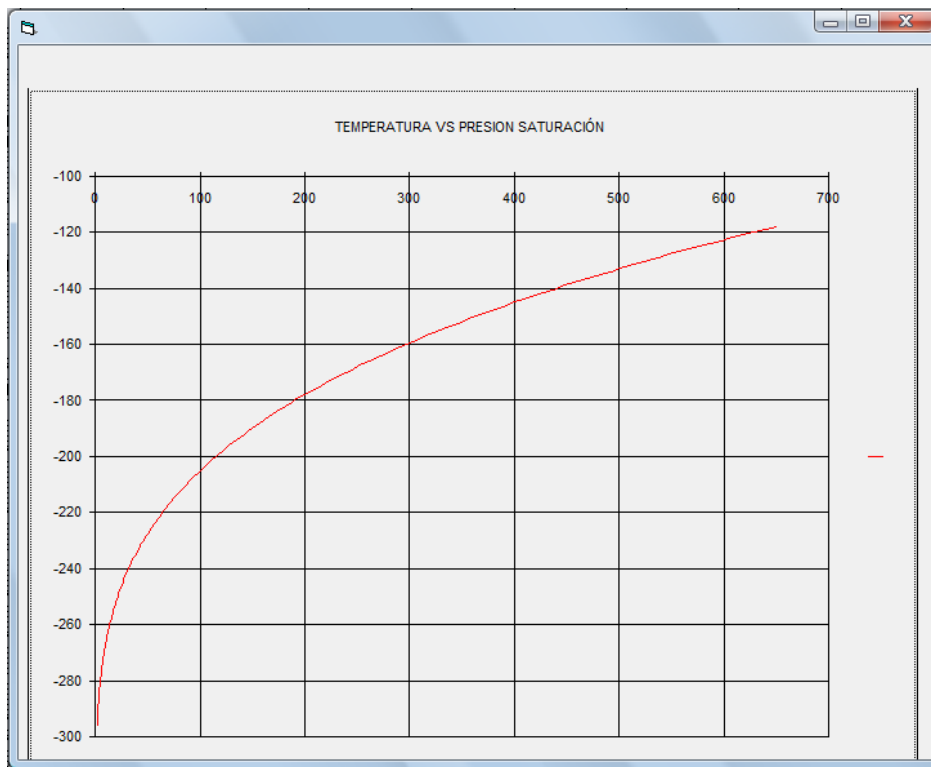
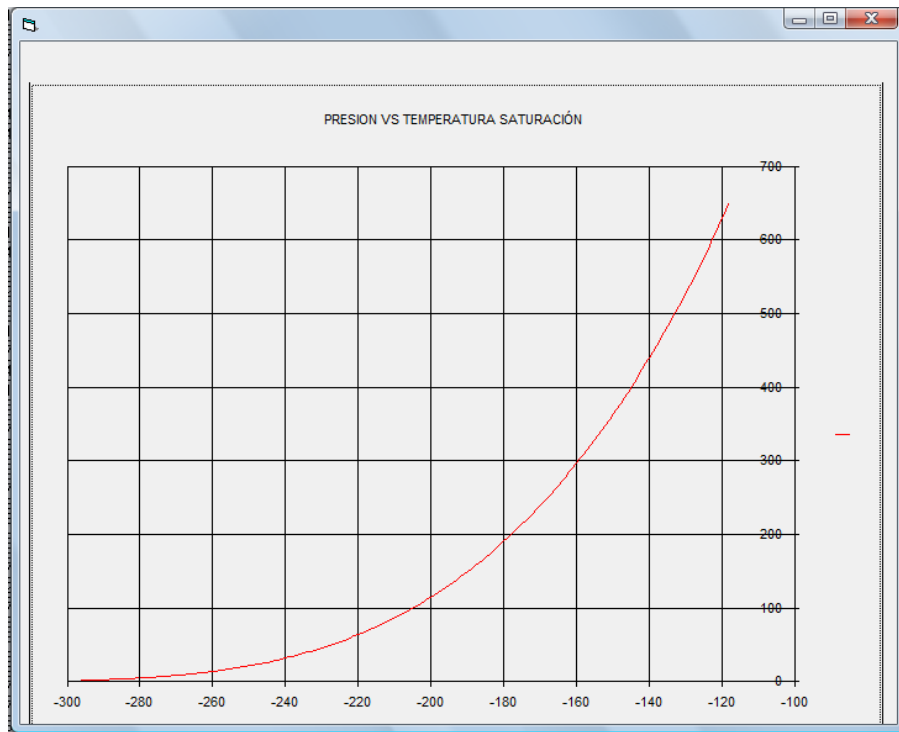


Propiedades Termodinámicas						
Tablas		Graficas		Exportar Salir		
T (F)	Densidad Molar	/ ft3)	VI (ft3 / lbm)	Vv (ft3 / lbm)	UI (btu / lbm)	Uv (btu / lbm)
-296.67		00960	0.034805	64.954010	-1943.1770	-1943.1770
-295.67	Volumen Específico	01025	0.034879	60.830210	-1942.6570	-1942.6570
-294.67	Entalpía	01093	0.034952	57.017750	-1942.1190	-1942.1190
-293.67	Energía Interna	01165	0.035026	53.491080	-1941.5640	-1941.5640
-292.67	Entropía	01241	0.035099	50.224690	-1940.9920	-1940.9920
-291.67		01321	0.035173	47.196630	-1940.4040	-1940.4040
-290.67	Fugacidad	Presión Saturación vs Fugacidad				
-289.67	Presión - Temperatura	Temperatura Saturación vs Fugacidad				
-288.67						





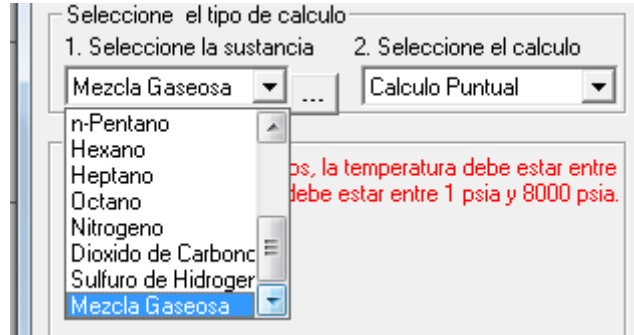
Propiedades Termodinámicas							
Tablas		Graficas	Exportar	Salir			
T (F)		Densidad Molar	/ ft3	VI (ft3 / lbm)	Vv (ft3 / lbm)	UI (btu / lbm)	Uv
-296.67		Volumen Especifico	0.00960	0.034805	64.954010	-1943.1770	
-295.67		Entalpía	0.01025	0.034879	60.830210	-1942.6570	
-294.67		Energía Interna	0.01093	0.034952	57.017750	-1942.1190	
-293.67		Entropía	0.01165	0.035026	53.491080	-1941.5640	
-292.67		Fugacidad	0.01241	0.035099	50.224690	-1940.9920	
-291.67		Presión - Temperatura	0.01321	0.035173	47.196630	-1940.4040	
-290.67			0.01404	0.035247	44.387420	-1939.8020	
-289.67							
-288.67							
-287.67	3.06	1.757496	0.01481	0.035321	41.800000	-1939.2000	
-286.67	3.27	1.753829	0.01561	0.035395	39.400000	-1938.6000	



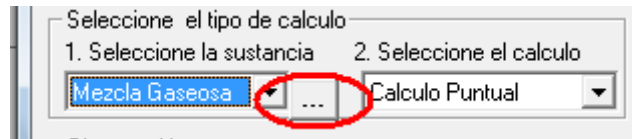
Al igual que en isotermas e isobaras seleccionamos la gráfica que deseamos visualizar y también podemos exportar los datos a Excel.

Para Sustancias Mezclas

Se selecciona del combo “1. Seleccione la sustancia” la opción “Mezcla Gaseosa”:



Se habilita el botón que aparece encerrado en color rojo:



Al dar clic en el anterior botón se abre la siguiente ventana:

Composición de la Mezcla

Digite la composición del gas

METANO	0.45
ETILENO	0
ETANO	0.55
PROPILENO	0
PROPANO	
I-BUTANO	
N-BUTANO	
I-PENTANO	
N-PENTANO	
HEXANO	
HEPTANO	
OCANO	
NITROGENO	
DOXIDO DE CARBONO	
SULFURO DE HIDROGENO	

Normalizar Ir a Selección de Cálculo...

Ingreso la composición de la mezcla y se da click en normalizar:

Normalizar Ir a Selección de Cálculo...

Composición de la Mezcla

Digite la composición del gas

METANO	0.450000
ETILENO	0.000000
ETANO	0.550000
PROPILENO	0.000000
PROPANO	0.000000
I-BUTANO	0.000000
N-BUTANO	0.000000
I-PENTANO	0.000000
N-PENTANO	0.000000
HEXANO	0.000000
HEPTANO	0.000000
OCANO	0.000000
NITROGENO	0.000000
DOXIDO DE CARBONO	0.000000
SULFURO DE HIDROGENO	0.000000

Normalizar Ir a Selección de Cálculo...

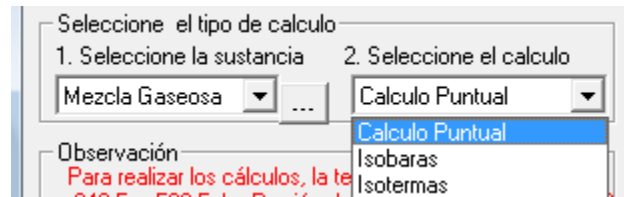
Se da click en “Ir a Selección de Cálculo”

Normalizar Ir a Selección de Cálculo...

Se selecciona el tipo de cálculo de las 3 opciones del combo 2. “Seleccione el cálculo”:

- Cálculo puntual
- Isobaras

- Isotermas



El procedimiento para sección del cálculo de las propiedades termodinámicas para mezclas es similar al de sustancias puras; igual muestra la ventana de propiedades en el caso de isobaras e isotermas con las mismas aplicaciones: tablas, gráficas y la opción de exportar datos a Excel.

Fin.