CONCLUSIONES

Este proyecto, analizó y llevó a cabo la aplicación de ecuaciones de estado y modelos correlativos para la predicción de propiedades termodinámicas de compuestos puros, mezclas binarias y multicomponentes.

Al finalizar este trabajo se ha llegado a las siguientes conclusiones:

- Existe una gran cantidad de “cajas negras” en el uso de los simuladores de proceso, y es nuestra labor llegar a la comprensión de cada una de ellas. Se logró comprender algunos procesos que realizan estos programas, en especial en el área de predicción de propiedades de compuestos puros. Se llevó a cabo un análisis de las ecuaciones de estado en todas las fases, y de esa manera se encontraron sus deficiencias. Algunas de ellas eran bien conocidas, sin embargo y más importante aún fue el encontrar respuesta a estas deficiencias mediante la correlación de datos.

- Se lograron crear varias aplicaciones con interfaces amigables con el usuario programadas en Excel y haciendo uso de visual Basic for applications. Estas aplicaciones pueden tener gran alcance didáctico.

- Se generó una extensa base de datos para 71 compuestos en la que se incluyen propiedades termofísicas, constantes de Antoine, constantes de Passut/Danner, así como coeficientes para distintas correlaciones de la fase heterogénea de compuestos puros.

- Se desarrolló un software para la predicción de propiedades de compuestos puros en el que se calculan volumen, factor de compresibilidad, entalpía

residual, entropía residual y fugacidad mediante las ecuaciones de estado de Redlich-Kwong, Soave-Redlich-Kwong y Peng & Robinson.

- Haciendo uso de las ecuaciones de Passut/Danner se calcularon capacidad calorífica, entalpía ideal y entropía ideal como función de la temperatura. No se hizo lo mismo con la ecuación de Spencer u alguna otra, porque hasta el momento no ha sido necesario. Sin embargo se requerirán, para completar la base de datos de los compuestos que no tienen constantes de Passut/Danner disponibles.

- A partir del cálculo de las propiedades anteriores fue posible calcular las propiedades reales de los compuestos, no sólo para un punto, sino también para una serie de presiones y/o temperaturas, tanto de fase homogénea como heterogénea.

- Se utilizaron los siete algoritmos de para el cálculo de presiones y temperaturas de burbuja y rocío, así como vaporización de mezclas binarias y multicomponentes.

- Se analizó la programación a base de celdas, y a base de lenguaje de alto nivel en VBA, y se encontró que es sumamente conveniente el manejo de VBA como lenguaje de programación, mientras que Excel puede seguir siendo utilizado como interfase de entrada y de salida.