

MANUALES DE ASPENONE. TERMODINÁMICA

Este documento describe la generación de una curva P vs T para una mezcla estireno – divinil benceno – dióxido de carbono, curva que divide la región del líquido – vapor de la región supercrítica.

DGAPA / PAPIME / PEI 103325

CURVAS
PRESIÓN vs
TEMPERATURA

Diagrama Presión vs Temperatura

Los diagramas P vs T o diagramas PT o diagramas de fase, representan las regiones de cada una de las fases acorde a la presión y temperatura establecida.

La utilidad de estos diagramas es predecir el comportamiento de las mezclas, especialmente en distintos procesos de separación.

La descripción detallada de como generar un nuevo proyecto en Aspen Plus, seleccionar componentes, ecuaciones de estado, se detalla en el archivo **Procedimiento de inicio.pdf**.

Este ejemplo, genera una curva PT para una mezcla de tres componentes:

Component ID	Type	Component name	Alias	CAS number
CARBO-01	Conventional	CARBON-DIOXIDE	CO2	124-38-9
STYRE-01	Conventional	STYRENE	C8H8	100-42-5
1:4-D-01	Conventional	1,4-DIETHENYLBENZENE	C10H10-N1	105-06-6

Las condiciones para obtener la curva PT fueron las siguientes:

Condición	Valor o Modelo
Ecuación de Estado	Peng-Robinson
Fases por considerar	Líquido-Vapor
Método de Convergencia	Estándar
Temperatura inicial	273.15 K
Número máximo de puntos	300

Properties < PTENV-1 PT Envelope x Methods - Specifications x +

Global Flowsheet Sections Referenced Comments

Property methods & options

Method filter: COMMON

Base method: PENG-ROB

Henry components

Petroleum calculation options

Free-water method: STEAM-TA

Water solubility: 3

Electrolyte calculation options

Chemistry ID

☒ Use true components

Method name: PENG-ROB

Methods Assistant...

Modify

EOS: ESRSTD

Data set: 1

Liquid gamma

Data set

Liquid molar enthalpy: HLMX106

Liquid molar volume: VLMX20

☐ Heat of mixing

☐ Poynting correction

☐ Use liquid reference state enthalpy

Componente	Composición Flujo molar (Kmol/h)
Dióxido de Carbono	90
Estireno	9
Divinil Benceno	1
Flujo Total	100

Properties < PTENV-1 PT Envelope x PTENV-1 (PTENVELOPE) - Input x +

System Tabulate Properties Diagnostic Results Comments Status

Mole kmol/hr

Component	Flow
CARBO-01	90
STYRE-01	9
1:4-D-01	1

Vapor fraction branches

☒ Dew/Bubble point curves

Additional vapor fraction	Complementary branch
*	

Optional specifications

Valid phases: Vapor-Liquid

Method: Standard

Maximum points: 300

Initial pressure: bar

Initial temperature: 273.15 K

Maximum density step: 0.2 kmol/cum

Run Analysis

Termination criteria (optional)

Standard method

Reduced temperature: 0

Density method

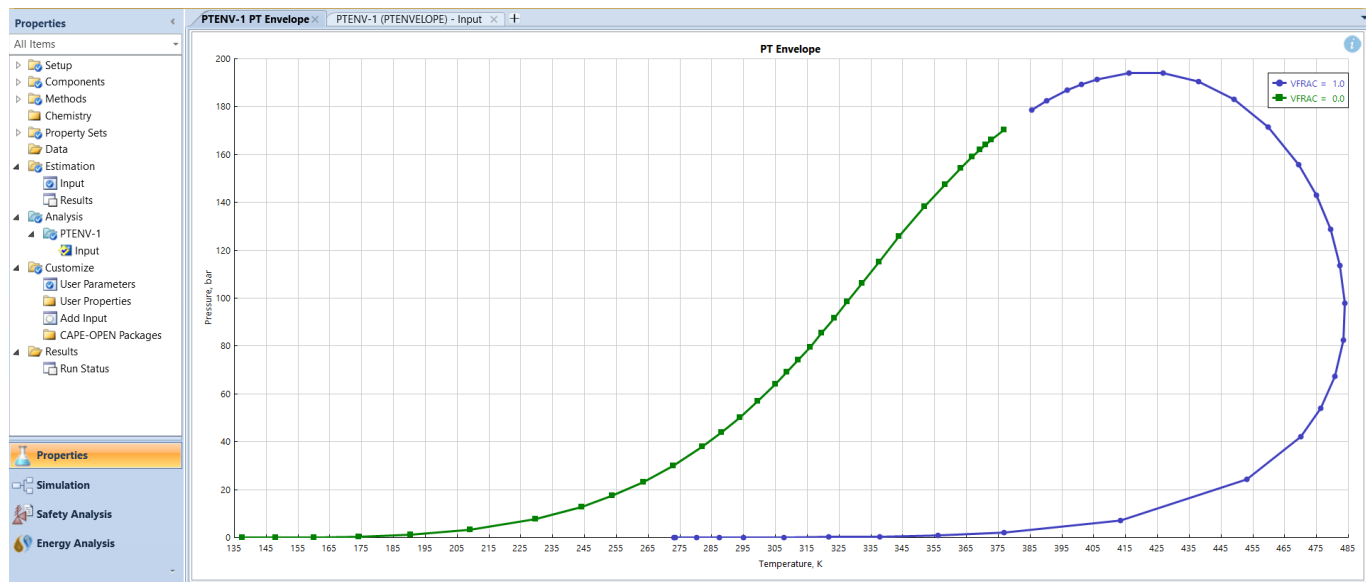
Minimum temperature: C

Maximum temperature: C

Minimum pressure: bar

Maximum pressure: bar

La curva obtenida fue la siguiente:



Los datos de los resultados se pueden desplegar en la carpeta “Analysis\PTENV-1\Input” en la pestaña “Results”.

Properties

PTENV-1 PT Envelope x PTENV-1 (PTENVELOPE) - Input x +

System Tabulate Properties Diagnostic Results Comments Status

Two-phase critical temperature Three-phase critical temperature

Two-phase critical pressure Three-phase critical pressure

Cricondentherm Pressure at cricondentherm

Cricondenbar Temperature at cricondenbar

VFRAC	TEMP	PRES
	K	bar
1	273.15	0.00696438
1	273.485	0.00715465
1	280.177	0.012064
1	287.327	0.0204014
1	294.989	0.0346067
1	307.582	0.0769269
1	321.725	0.172361
1	337.734	0.389504
1	355.977	0.888062
1	376.839	2.04174
1	413.403	7.16997
1	453.148	24.243
1	469.993	42.0558
1	476.343	53.8864
1	480.85	67.4651
1	483.338	82.3564

Properties

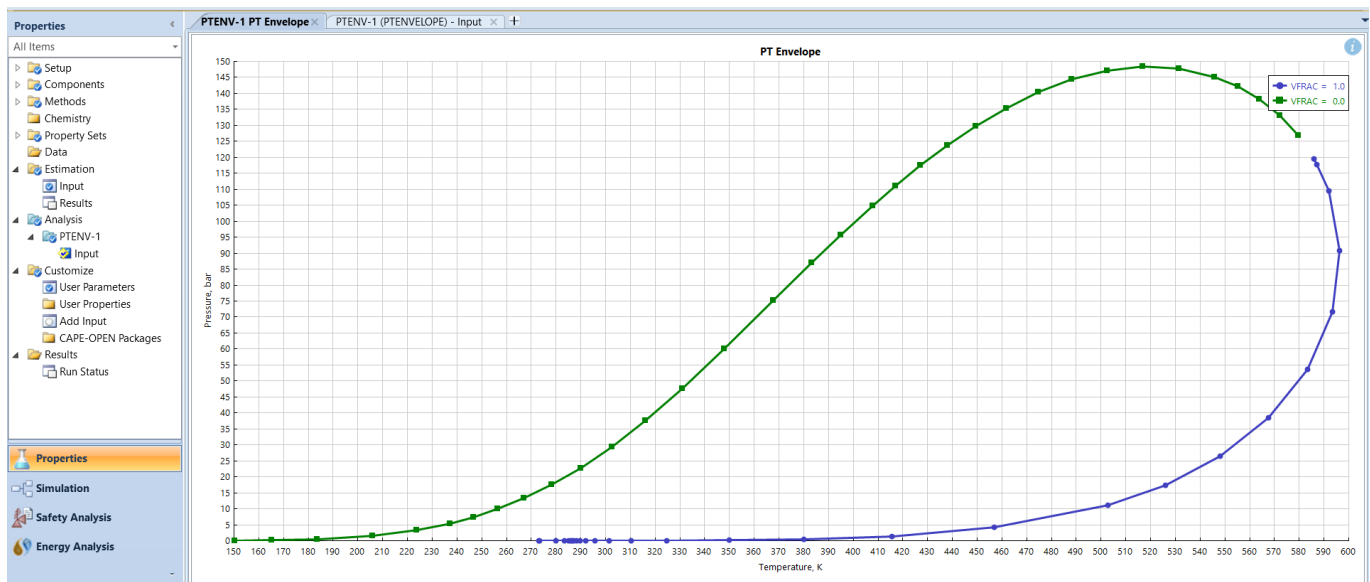
Simulation

Safety Analysis

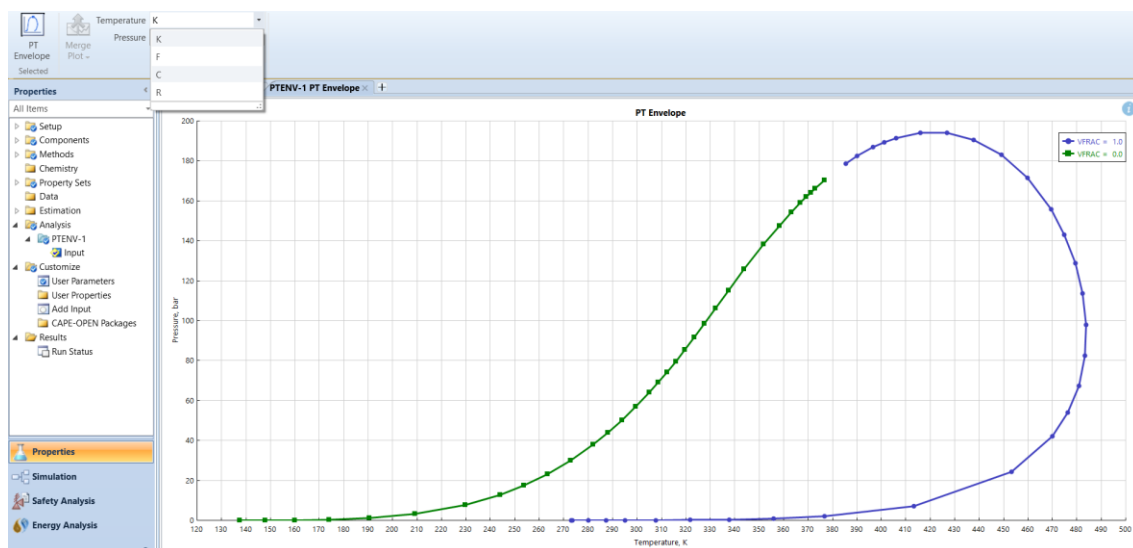
Energy Analysis

Si cambiamos la composición de la mezcla a la que se muestra en la tabla siguiente, la curva cambiará en su forma y en el área bajo la campana (fases líquido-vapor) y por ende cambia la región del estado supercrítico (fuera de la campana).

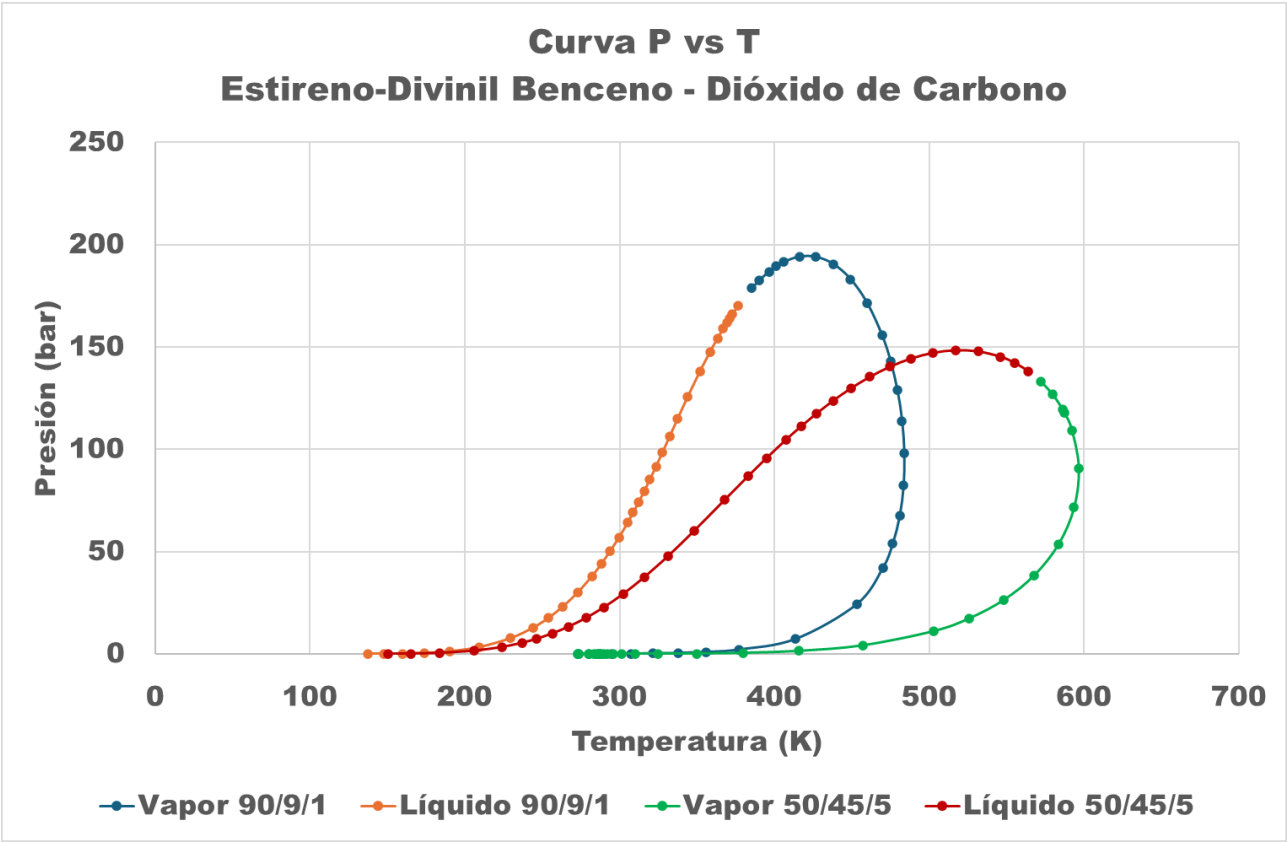
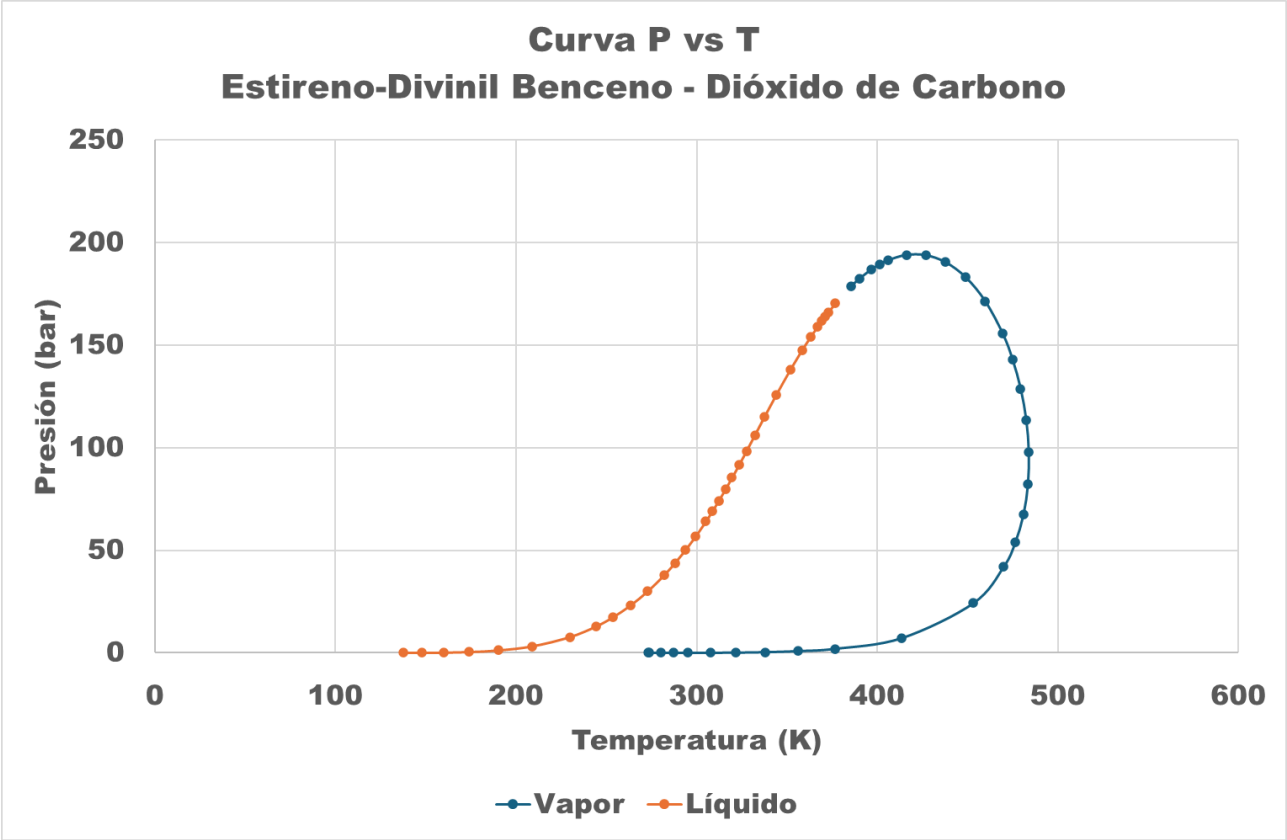
Componente	Composición Flujo molar (Kmol/h)
Dióxido de Carbono	50
Estireno	45
Divinil Benceno	5
Flujo Total	100



Es posible cambiar en la gráfica las unidades tanto la temperatura como de la presión.



Los datos se pueden seleccionar y copiar a una hoja en Excel. La curva obtenida es como la siguiente:



Referencias:

1. Segovia-Hernández, J. G., & Gómez-Castro, F. I. (2017). *Stochastic process optimization using Aspen Plus®*.
2. Schefflan, R. (2016). *Teach yourself the basics of Aspen Plus*. John Wiley & Sons.
3. Sandler, S. I. (2015). *Using Aspen Plus in thermodynamics instruction: A Step-by-Step Guide*. John Wiley & Sons.
4. Al-Malah, K. I. M. (2016). *Aspen Plus: Chemical Engineering Applications*. John Wiley & Sons.
5. Haydary, J. (2019). *Chemical Process design and simulation: Aspen Plus and Aspen HySys applications*. John Wiley & Sons.
6. Luyben, W. L. (2013). *Distillation design and control using Aspen simulation*. John Wiley & Sons.
7. Medeiros, M. (2024). *Equilibrio de Fases y Químico* (2nd ed.). Facultad de Química, UNAM.

Agradecimientos:

PROGRAMA DE APOYO A PROYECTOS PARA INNOVAR Y MEJORAR LA EDUCACIÓN 2023.

DGAPA / PAPIME / PE103523

INCORPORACION DE TIC'S PARA LA ENSEÑANZA Y EVALUACION DEL DESEMPEÑO DE LOS ALUMNOS EN ASIGNATURAS COMPARTIDAS DE DOS CARRERAS DE LA FACULTAD DE QUIMICA.

