

MANUALES DE ASPENONE. TERMODINÁMICA

Este documento describe la generación de una Temperatura vs
composición x, y para una mezcla ideal tolueno – estireno.

DGAPA / PAPIME / PEI 103325

CURVAS DE
COMPOSICIÓN
BINARIA.
MEZCLA IDEAL

Diagrama T vs x, y para una mezcla ideal.

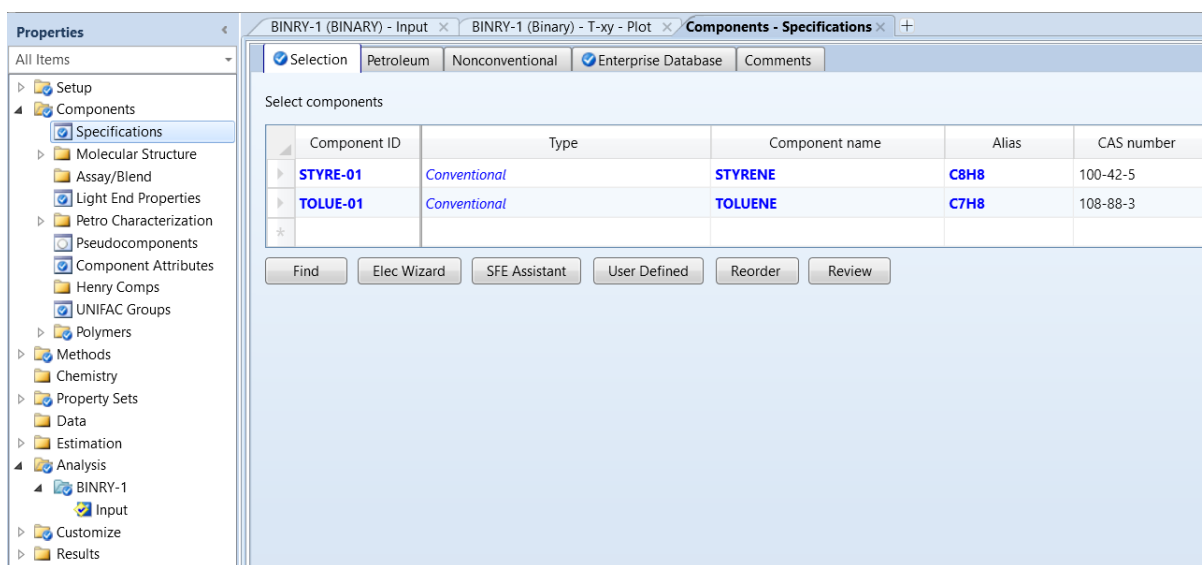
La descripción detallada de como generar un nuevo proyecto en Aspen Plus, seleccionar componentes, ecuaciones de estado, se detalla en el archivo **Procedimiento de inicio.pdf**.

Los diagramas Txy nos permiten distinguir las cinco regiones en las cuales se divide el diagrama:

- Región del líquido subenfriado.
- Línea del líquido saturado (puntos de rocío).
- Región del equilibrio líquido – vapor.
- Línea del vapor saturado (puntos de burbuja).
- Región del vapor sobrecalentado.

Estas regiones son importantes en ser visualizadas para entender las distintas formas en las cuales puede ser alimentado una columna de destilación multietapa binaria y como esa información se extrapola a una columna de destilación multietapa y multicomponente.

Este ejemplo, genera una curva Txy para una mezcla de dos hidrocarburos aromáticos, formados únicamente por carbono e hidrógeno. Esta mezcla tiene características que se apegan a modelos ideales, al no tener heteroátomos como oxígeno, halógenos o nitrógeno.



Las condiciones para obtener la curva Txy fueron las siguientes:

Condición	Valor o Modelo
Ecuación de Estado	Peng-Robinson
Fases por considerar	Líquido-Vapor
Base	Fracción mol de estireno
Intervalo de composición	0.0 – 1.0
Presiones (bar)	0.5, 1.0, 2.0
Número de puntos	100

Properties

All Items

- Setup
- Components
- Methods
 - Specifications
 - Selected Methods
 - Parameters
 - Routes
 - NC Props
 - Tabpoly
 - Chemistry
- Property Sets
- Data
- Estimation
- Analysis
 - BINRY-1
 - Input
- Customize
- Results

BINRY-1 (BINARY) - Input | **BINRY-1 (Binary) - T-xy - Plot** | **Methods - Specifications**

☒ 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: **ESPRSTD**

Data set: **1**

Liquid gamma: **1**

Data set: **1**

Liquid molar enthalpy: **HLMX106**

Liquid molar volume: **VLMX20**

☐ Heat of mixing

☐ Poynting correction

☐ Use liquid reference state enthalpy

Properties

All Items

- Setup
- Components
- Methods
 - Specifications
 - Selected Methods
 - Parameters
 - Routes
 - NC Props
 - Tabpoly
 - Chemistry
- Property Sets
- Data
- Estimation
- Analysis
 - BINRY-1
 - Input
- Customize
- Results

BINRY-1 (BINARY) - Input | **BINRY-1 (Binary) - T-xy - Plot** | **Methods - Specifications**

☒ Binary Analysis | Tabulate | ☒ Calculation Options | Diagnostics | Results | Comments | ☒ Status

Analysis type: **Txy**

Components

Component 1: **STYRE-01**

Component 2: **TOLUE-01**

Pseudo-Binary

☐ Pseudo-binary system

Entrainment

Entrainment fraction:

Compositions

Basis: **Mole fraction**

Vary: **STYRE-01**

☒ Equidistant ☐ Logarithmic ☐ List of values

Start point: **0**

End point: **1**

☒ Number of intervals: **100**

☐ Increment: **0.01**

Pressure

Units: **bar**

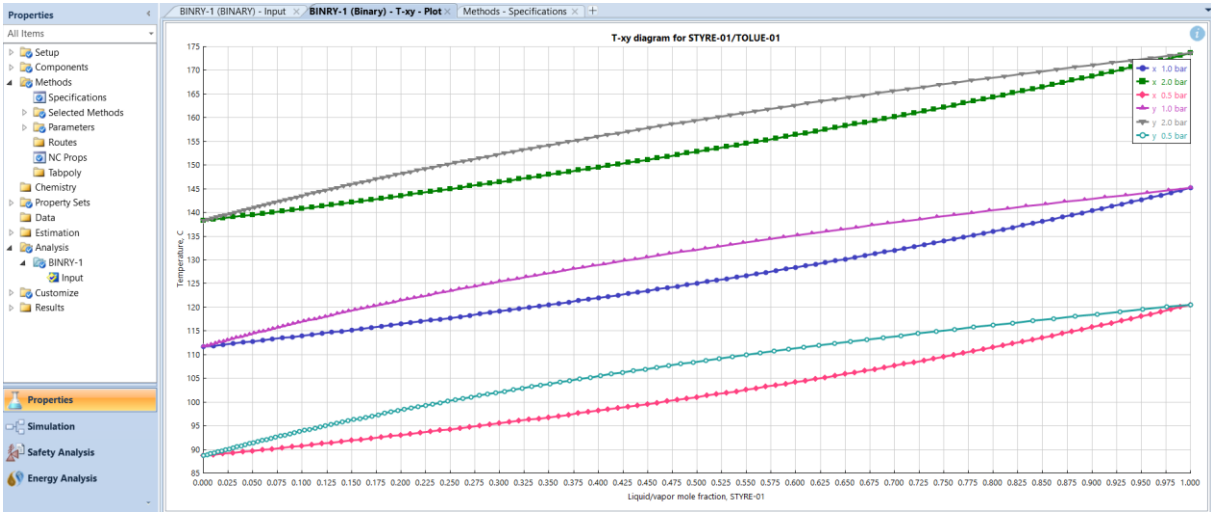
☐ Equidistant ☒ List of values

Enter Values:

	1
	2
	0.5

Run Analysis

Las curvas obtenidas fueron las siguientes:



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

PRES	MOLEFRAC STYRE-01	TOTAL TEMP	TOTAL KVL STYRE-01	TOTAL KVL TOLUE-01	LIQUID1 GAMMA STYRE-01	LIQUID1 GAMMA TOLUE-01	LIQUID2 GAMMA STYRE-01	LIQUID2 GAMMA TOLUE-01	TOTAL KVL2 STYRE-01	TOTAL KVL2 TOLUE-01	TOTAL BETA	VAPOR MOLEFRAC STYRE-01
bar		C										
1	0	111.676	0.392467	1	1.00461	1					1	0
1	0.01	111.902	0.395185	1.00611	1.00451	1					1	0.00395185
1	0.02	112.129	0.397936	1.01229	1.00441	1					1	0.00795874
1	0.03	112.357	0.400721	1.01854	1.00431	1.00001					1	0.0120216
1	0.04	112.586	0.40354	1.02485	1.00422	1.00001					1	0.0161416
1	0.05	112.817	0.406394	1.03124	1.00412	1.00001					1	0.0203197
1	0.06	113.05	0.409283	1.03771	1.00403	1.00002					1	0.024557
1	0.07	113.284	0.412209	1.04424	1.00393	1.00003					1	0.0288546
1	0.08	113.52	0.41517	1.05086	1.00384	1.00003					1	0.0332136
1	0.09	113.757	0.418169	1.05754	1.00375	1.00004					1	0.0376352
1	0.1	113.996	0.421206	1.06431	1.00367	1.00005					1	0.0421206
1	0.11	114.236	0.424281	1.07116	1.00358	1.00006					1	0.0466709
1	0.12	114.478	0.427396	1.07808	1.00349	1.00008					1	0.0512875
1	0.13	114.722	0.43055	1.08509	1.00341	1.00009					1	0.0559715
1	0.14	114.967	0.433745	1.09218	1.00332	1.0001					1	0.0607243
1	0.15	115.214	0.436981	1.09936	1.00324	1.00012					1	0.0655471
1	0.16	115.463	0.440259	1.10662	1.00316	1.00013					1	0.0704414
1	0.17	115.713	0.44358	1.11397	1.00308	1.00015					1	0.0754086
1	0.18	115.965	0.446945	1.1214	1.003	1.00017					1	0.08045

Es posible cambiar en la gráfica las unidades tanto la temperatura como de la presión y la base fracción mol.



T-xy



Merge Plot

Component

STYRE-01

Temperature

C

Pressure

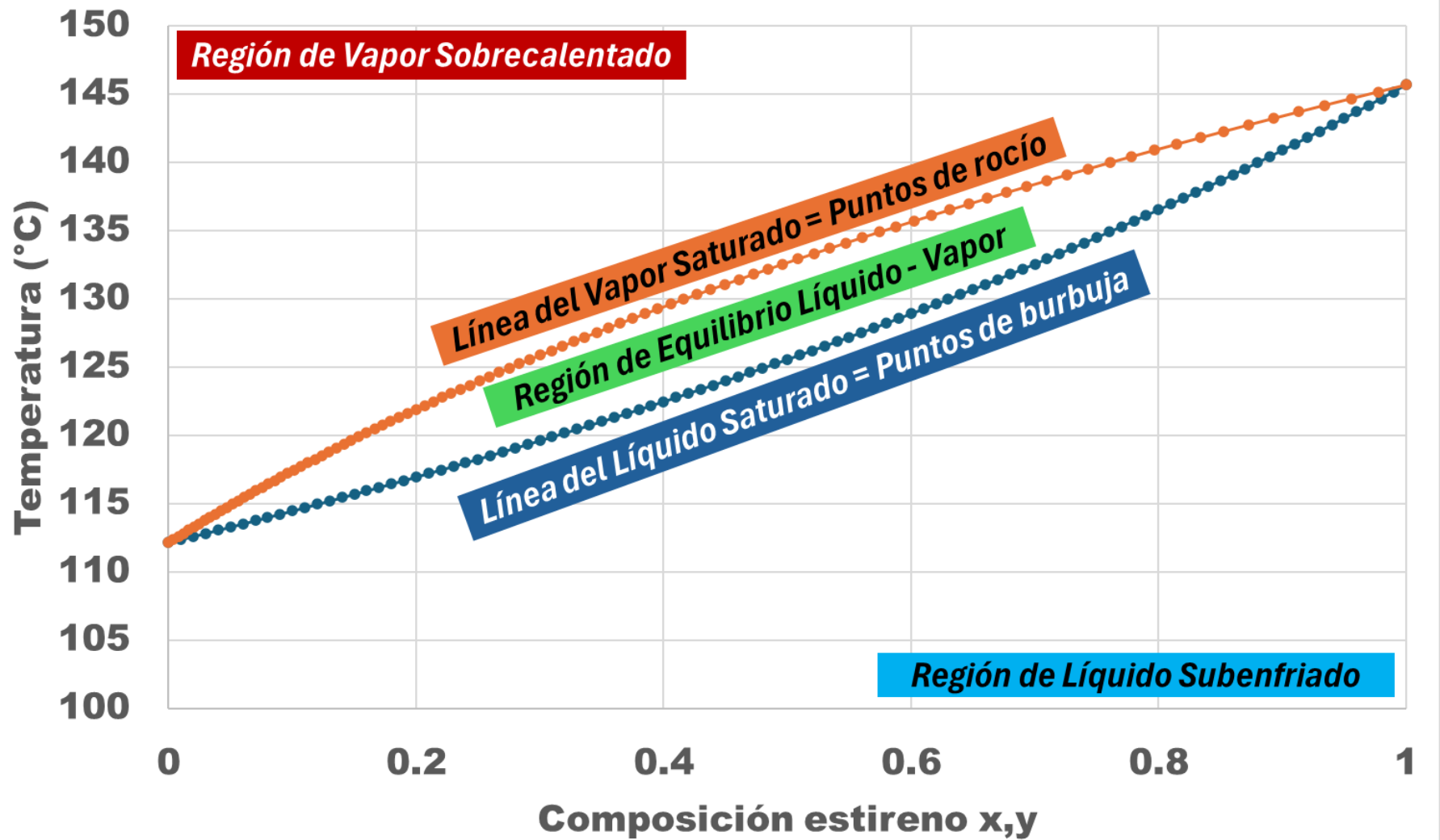
bar

Selected

Data

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

Diagrama Binario Estireno - Tolueno



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.

