

MANUALES DE ASPENONE. TERMODINÁMICA

Este documento describe la generación de una curva de temperatura vs composición x, y para una mezcla no ideal 1-propanol – agua.

DGAPA / PAPIME / PEI 103325

CURVAS DE
COMPOSICIÓN
BINARIA.
MEZCLA NO
IDEAL

Diagrama T vs x, y para una mezcla no ideal.

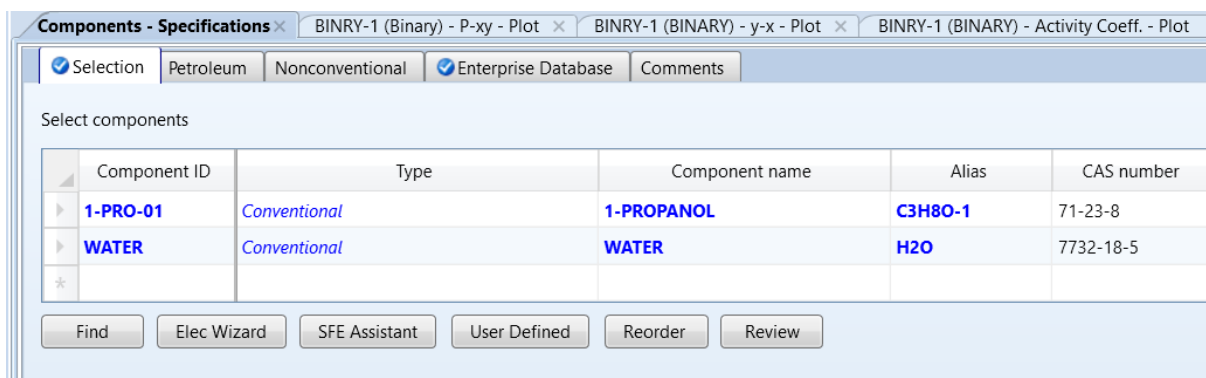
La descripción detallada de como generar un nuevo proyecto en Aspen Plus, seleccionar componentes, ecuaciones de estado, se detalla en el archivo **Procedimiento de inicio.pdf**.

Los diagramas Txy, Pxy, xy nos permiten distinguir las cinco regiones en las cuales se divide el diagrama y ubicar puntos específicos:

- 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.
- Punto azeotrópico.

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 y las regiones en las que estaría limitado el proceso de destilación convencional.

Este ejemplo, genera una curva Txy, Pxy, coeficientes de actividad vs xy, además del diagrama y vs x, para una mezcla del 1-propanol y del agua. Dos componentes que, al tener oxígeno en su estructura, generan puentes de hidrógeno, generando así diagramas con un punto azeotrópico.



Las condiciones para obtener las curvas fueron las siguientes:

Condición	Valor o Modelo
Ecuación de Estado	PC-SAFT
Fases por considerar	Líquido-Vapor
Base	Fracción mol de 1-propanol
Intervalo de composición	0.0 – 1.0
Temperatura (°F)	77
Número de puntos	100

Properties

All Items

- Setup
- Components
 - Specifications
 - Molecular Structure
 - Assay/Blend
 - Petro Characterization
 - Light End Properties
 - Pseudocomponents
 - Component Attributes
 - Henry Comps
 - UNIFAC Groups
- Polymers
- Methods
 - Specifications
 - Selected Methods
 - Parameters
 - Routes
 - NC Props
 - Tabpoly
 - Chemistry
 - Property Sets
 - Data

Methods - Specifications

Global | Flowsheet Sections | Referenced | Comments

Property methods & options

Method filter: **COMMON**

Base method: **PC-SAFT**

Henry components

Perturbed-Chain Statistical Associating Fluid Theory (PC-SAFT) property method for copolymer systems

Petroleum calculation options

Free-water method: **STEAM-TA**

Water solubility: **3**

Electrolyte calculation options

Chemistry ID

☒ Use true components

Method name: **PC-SAFT**

Methods Assistant...

Data set

Liquid gamma

Data set

Liquid molar enthalpy: **HLMXPA**

Liquid molar volume: **VLMXPA**

☐ Heat of mixing

☐ Poynting correction

☐ Use liquid reference state enthalpy

Properties

All Items

- Setup
- Components
 - Specifications
 - Molecular Structure
 - Assay/Blend
 - Petro Characterization
 - Light End Properties
 - Pseudocomponents
 - Component Attributes
 - Henry Comps
 - UNIFAC Groups
- Polymers
- Methods
 - Chemistry
 - Property Sets
 - Data
 - Estimation
 - Analysis
 - BINRY-1
 - Input
 - Customize
 - Results

BINRY-1 (BINARY) - Input

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

Analysis type: **Pxy**

Components

Component 1: **1-PRO-01**

Component 2: **WATER**

Pseudo-Binary

☐ Pseudo-binary system

Entrainer

Entrainer fraction

Compositions

Basis: **Mole fraction**

Vary: **1-PRO-01**

☒ Equidistant ☐ Logarithmic ☐ List of values

Start point: **0**

End point: **1**

☒ Number of intervals: **100**

☐ Increment: **0.01**

Run Analysis

Temperature

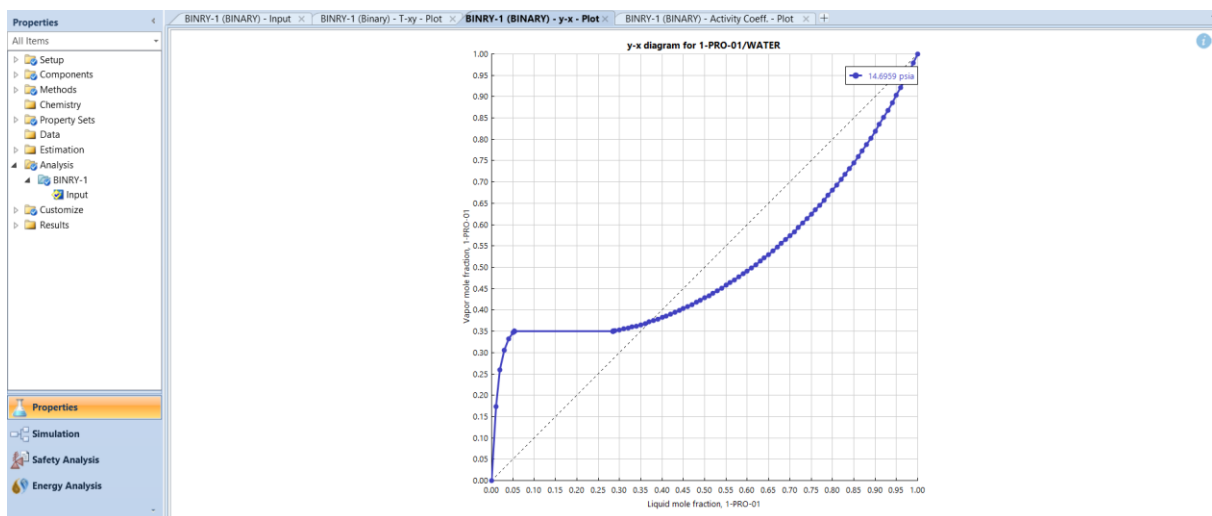
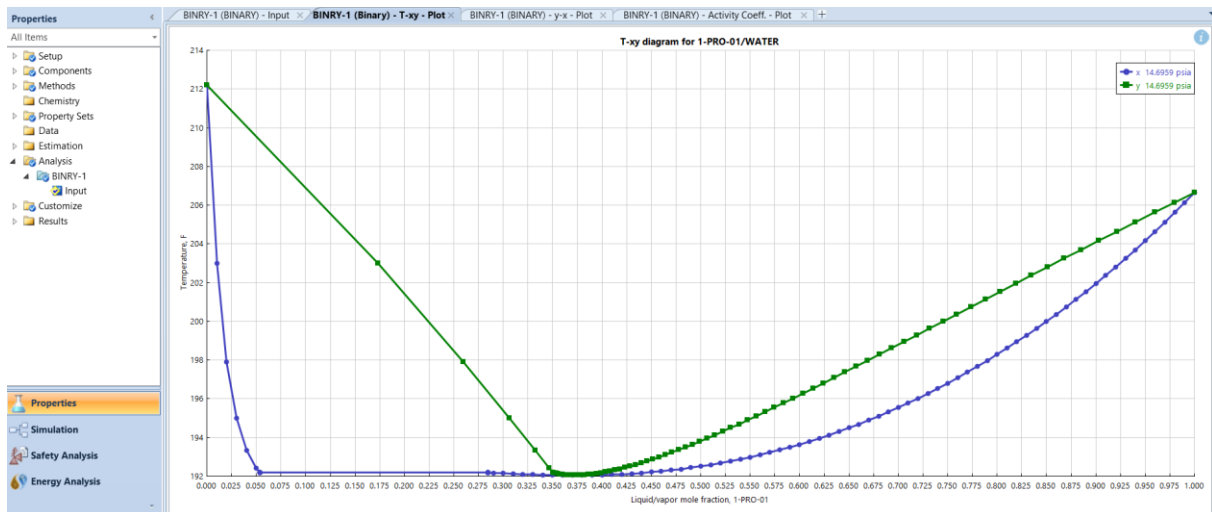
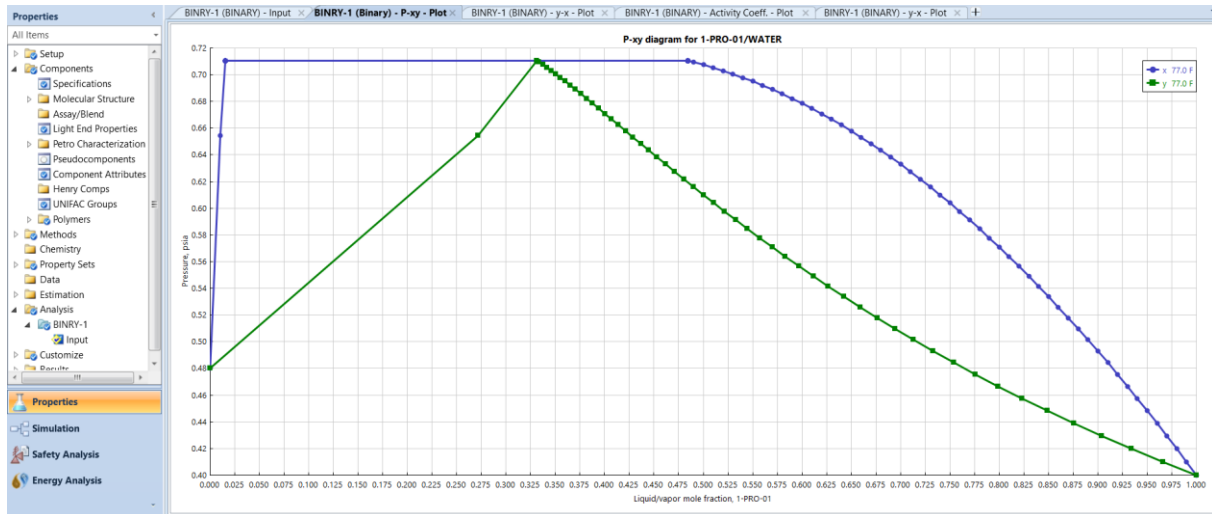
Units: **F**

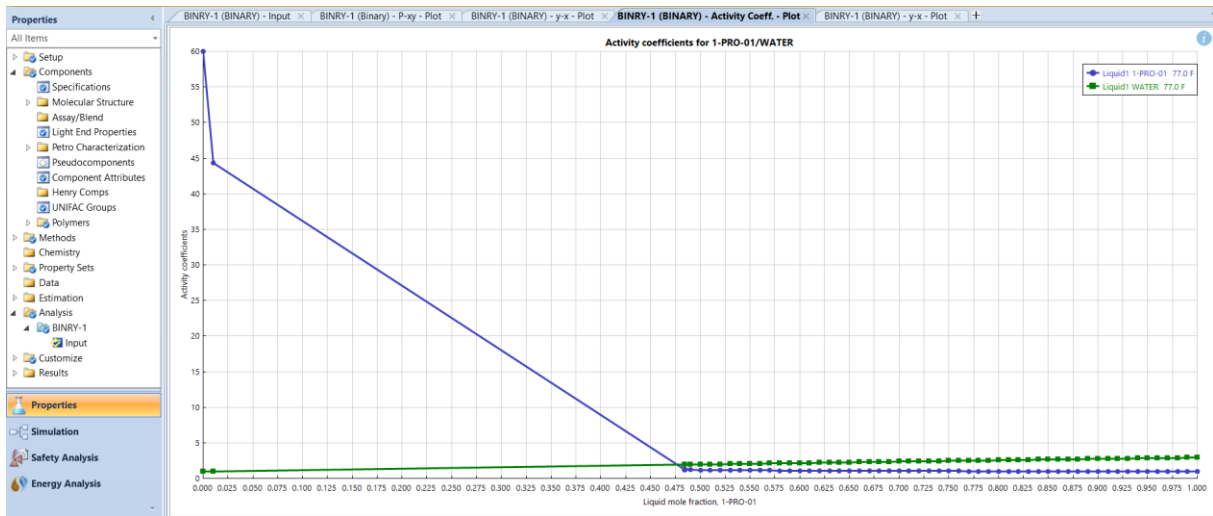
☐ Equidistant ☒ List of values

Enter Values

77

Las curvas obtenidas fueron las siguientes:

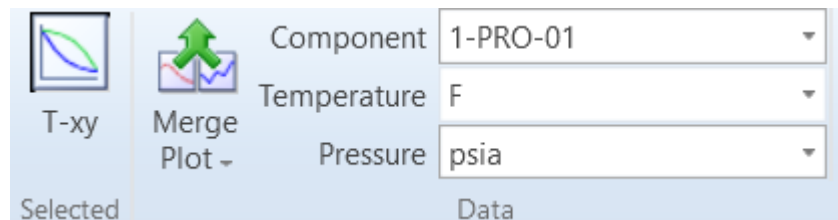




Los datos de los resultados se pueden desplegar en la carpeta “Analysis\BINRY-1\Input” en la pestaña “Results”.

PRES	MOLEFRAC 1-PRO-01	TOTAL TEMP	TOTAL KV1 1-PRO-01	TOTAL KV1 WATER	LIQUID1 GAMMA 1-PRO-01	LIQUID1 GAMMA WATER	LIQUID2 GAMMA 1-PRO-01	LIQUID2 GAMMA WATER	TOTAL KV12 1-PRO-01	TOTAL KV12 WATER	TOTAL BETA	VAPOR MOLEFRAC 1-PRO-01
psia		F										
14.696	0	212.217	24.91	1	22.4759	1					1	0
14.696	0.01	203.011	17.3554	0.834795	18.8368	1.00114					1	0.173554
14.696	0.02	197.91	12.991	0.755285	15.6722	1.00437					1	0.259821
14.696	0.03	195.014	10.2096	0.715236	13.0925	1.00941					1	0.306227
14.696	0.04	193.353	8.30661	0.695562	11.036	1.016					1	0.33226
14.696	0.05	192.421	6.93729	0.687511	9.40272	1.02391					1	0.346864
14.696	0.06	192.186	1.23242	0.907607	1.67885	1.35833	8.85935	1.02732	6.50352	0.686433	0.0264332	0.350569
14.696	0.07	192.186	1.23247	0.90759	1.67892	1.35831	8.85954	1.02732	6.50364	0.686431	0.0698156	0.35057
14.696	0.08	192.186	1.23251	0.907578	1.67898	1.35829	8.85966	1.02732	6.50373	0.68643	0.1132	0.35057
14.696	0.09	192.186	1.23254	0.90757	1.67902	1.35828	8.85975	1.02732	6.50379	0.68643	0.156584	0.35057
14.696	0.1	192.186	1.23256	0.907563	1.67904	1.35827	8.8598	1.02732	6.50384	0.68643	0.199969	0.35057
14.696	0.11	192.186	1.23257	0.907559	1.67907	1.35827	8.85984	1.02732	6.50386	0.68643	0.243353	0.35057
14.696	0.12	192.186	1.23259	0.907555	1.67908	1.35826	8.85987	1.02732	6.50388	0.68643	0.286738	0.35057
14.696	0.13	192.186	1.23259	0.907553	1.67909	1.35826	8.85989	1.02732	6.5039	0.686429	0.330122	0.35057
14.696	0.14	192.186	1.2326	0.907551	1.6791	1.35825	8.8599	1.02732	6.5039	0.686429	0.373506	0.35057
14.696	0.15	192.186	1.2326	0.90755	1.67911	1.35825	8.85991	1.02732	6.50391	0.686429	0.416889	0.35057
14.696	0.16	192.186	1.23261	0.907549	1.67911	1.35825	8.85991	1.02732	6.50391	0.686429	0.460273	0.35057
14.696	0.17	192.186	1.23261	0.907548	1.67912	1.35825	8.85992	1.02732	6.50392	0.686429	0.503656	0.35057
14.696	0.18	192.186	1.23261	0.907548	1.67912	1.35825	8.85992	1.02732	6.50392	0.686429	0.547039	0.35057

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



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

Gráfico Txy 1-propanol/agua

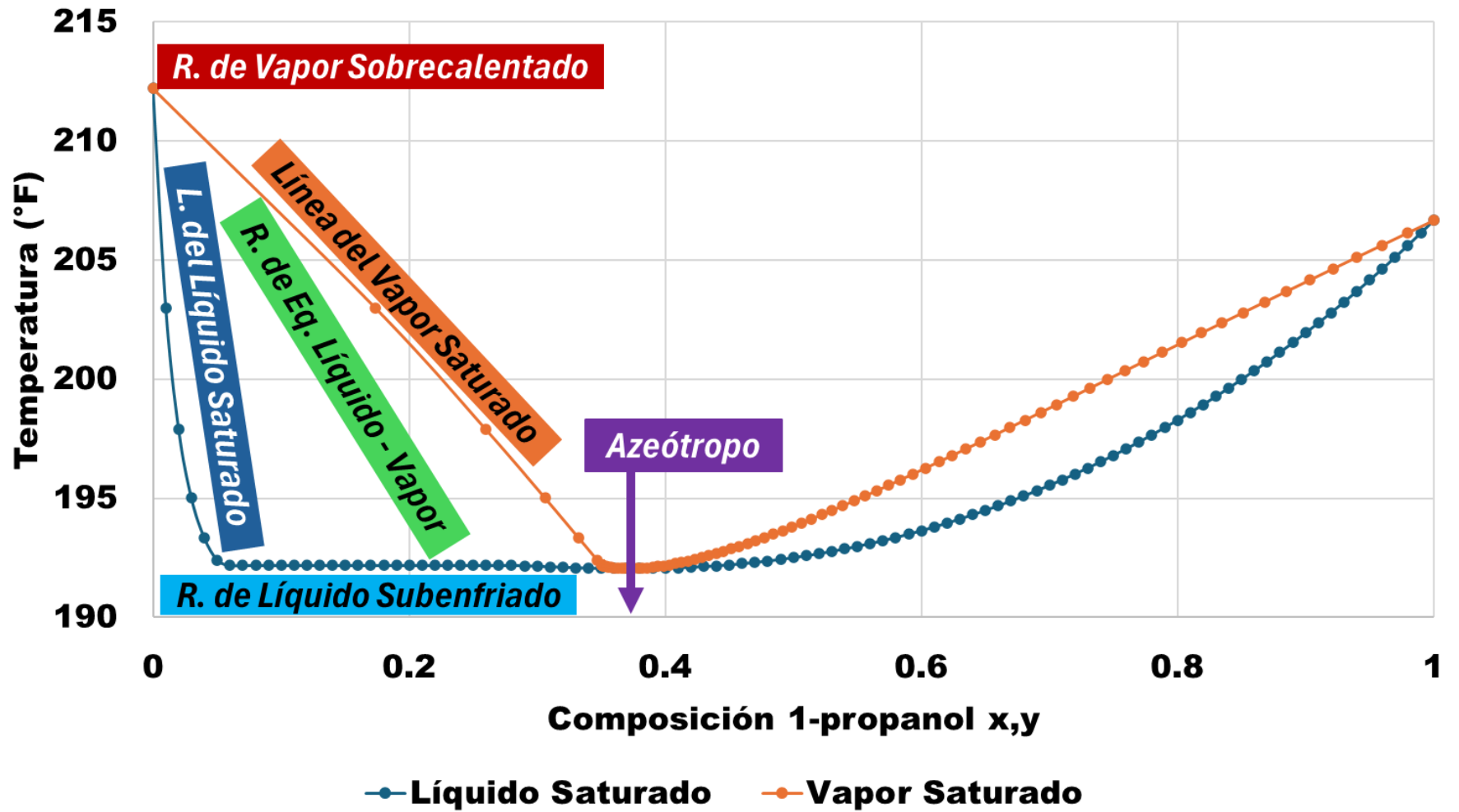


Gráfico Pxy 1-propanol/agua

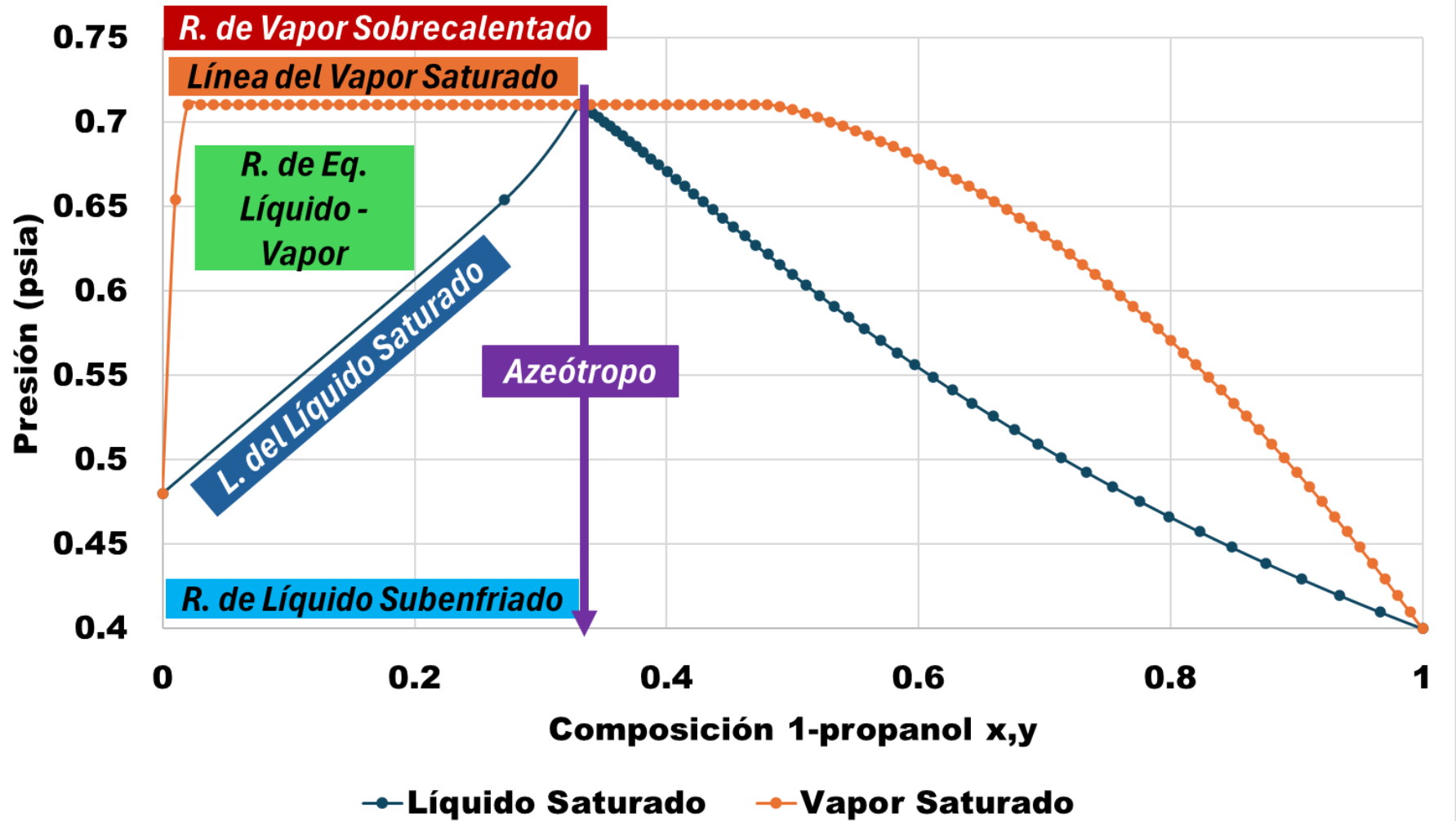


Gráfico xy 1-propanol/agua

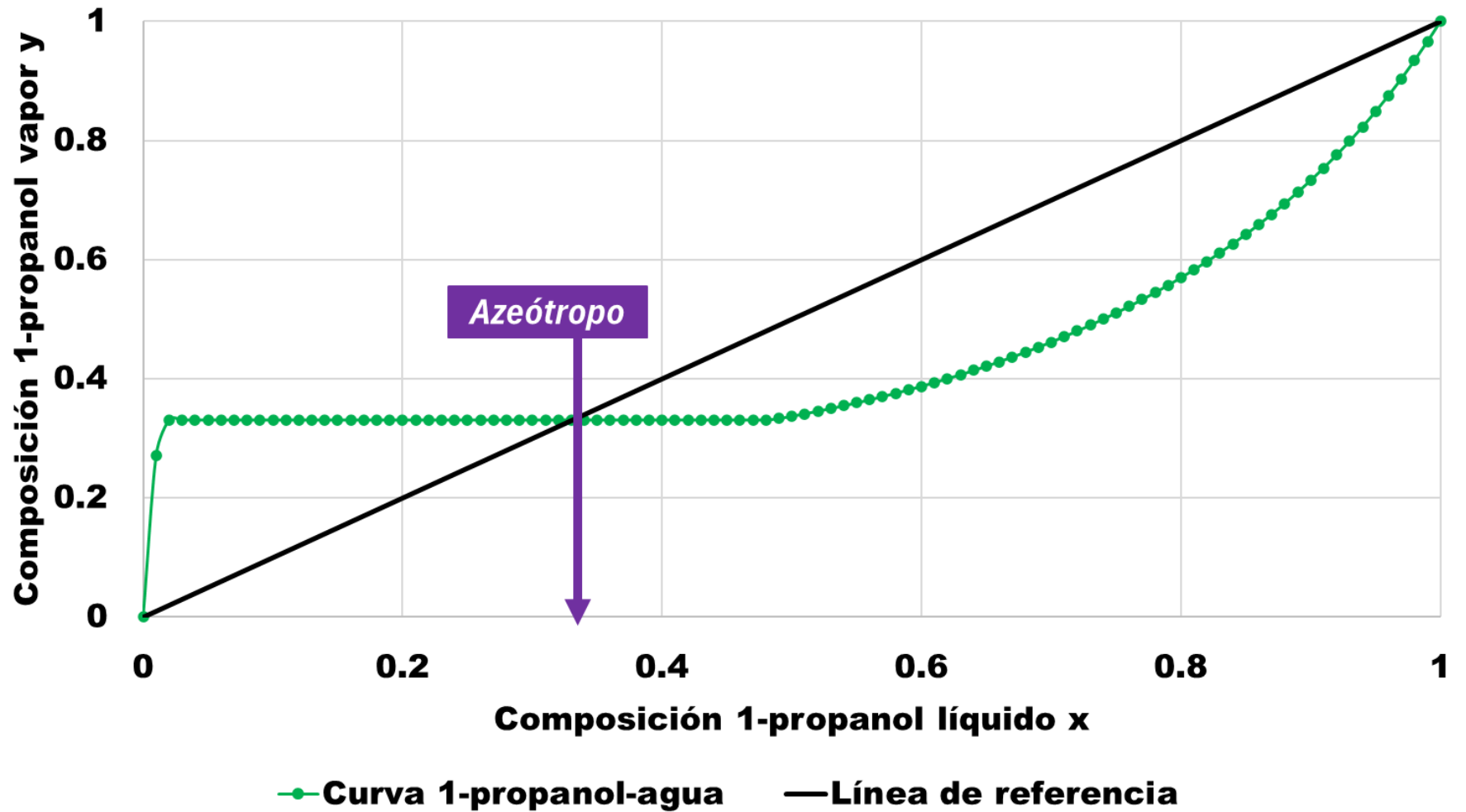
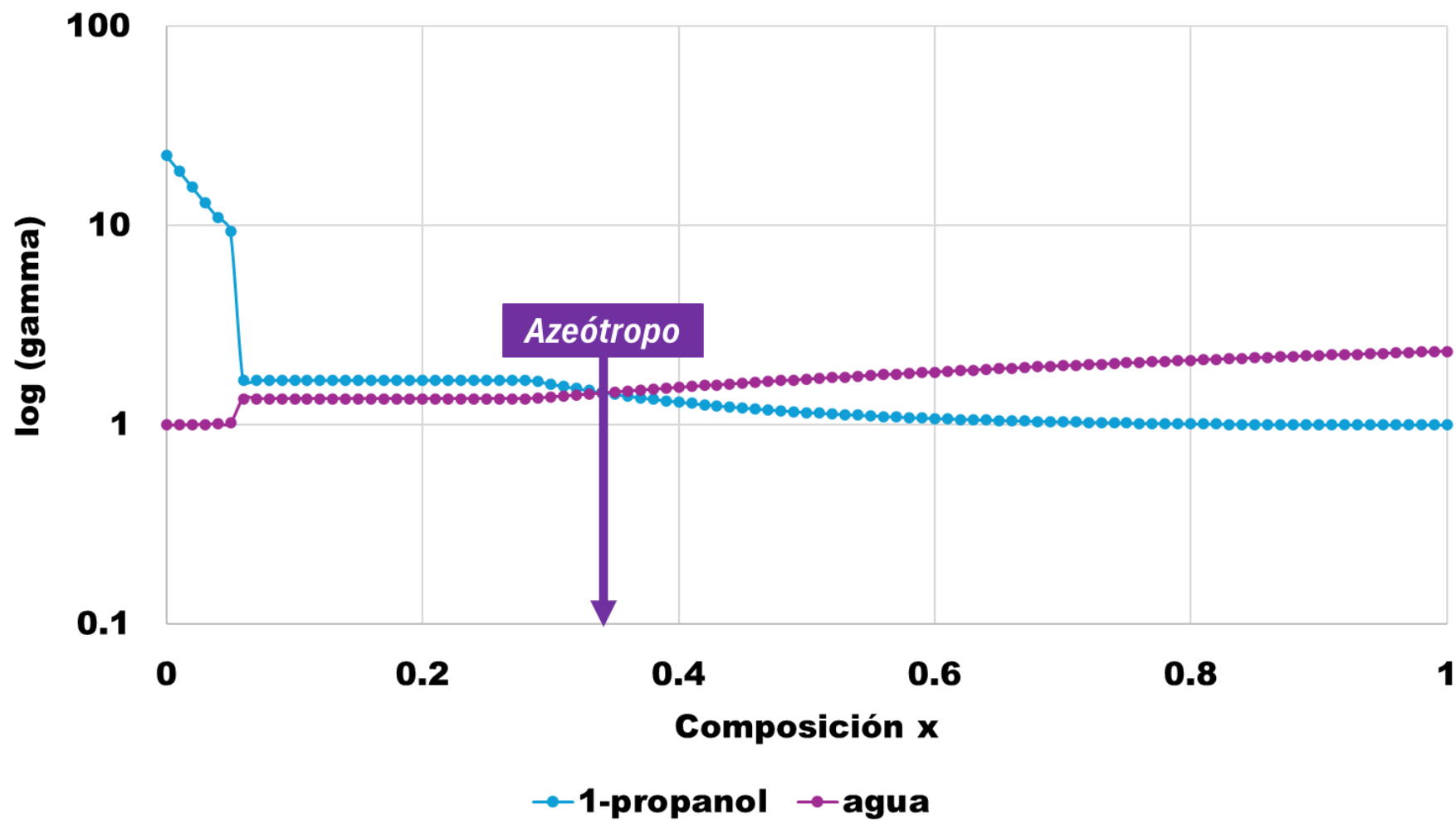


Gráfico coeficientes de actividad gamma 1-propanol/agua



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.

