

# MANUALES DE ASPENONE. TERMODINÁMICA

Este documento describe la generación de una curva de temperatura vs composición x, y para una mezcla real etanol – agua empleando la ecuación de Wilson.

DGAPA / PAPIME / PEI 103325

CURVAS DE  
COMPOSICIÓN  
BINARIA.  
MEZCLA REAL  
ETANOL – AGUA  
EMPLEANDO LA  
ECUACIÓN DE  
WILSON

## Diagrama T vs x, y para una mezcla real.

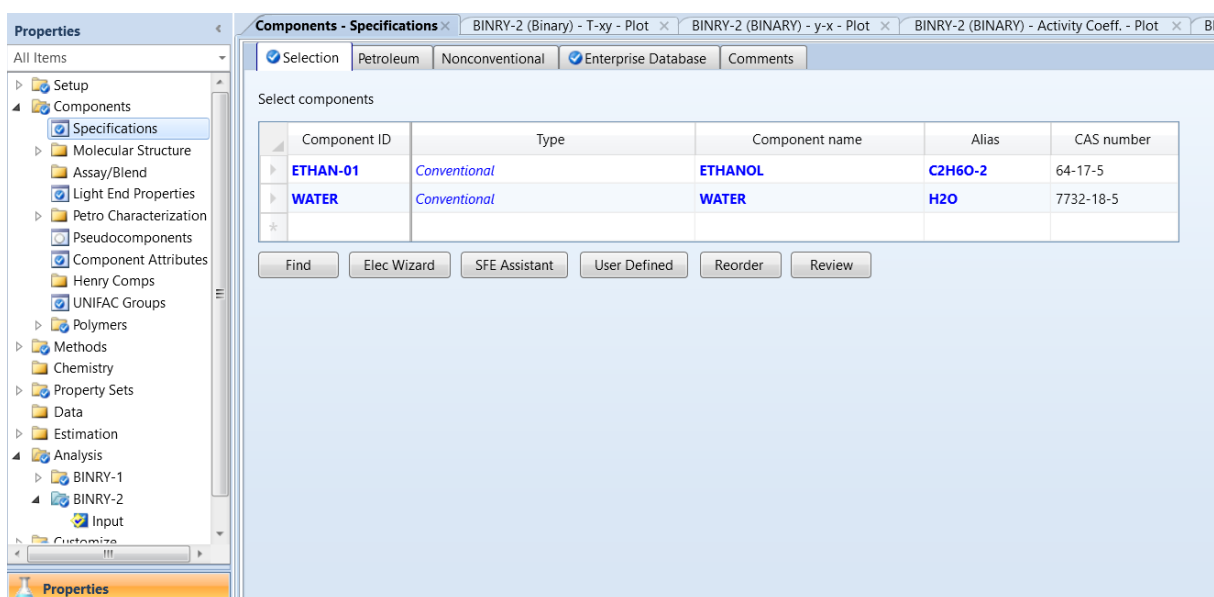
La descripción detallada de como generar un nuevo proyecto en Aspen Plus, seleccionar componentes, ecuaciones de estado, se detalla en el archivo **Procedimiento de inicio.pdf**.

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 etanol y del agua empleando la ecuación de Wilson. Este ejemplo se toma del libro “Distillation” de Gorak. Al tener dos componentes que contienen 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       | Wilson                   |
| Fases por considerar     | Líquido-Vapor            |
| Base                     | Fracción mol de 1-etanol |
| Intervalo de composición | 0.0 – 1.0                |
| Temperatura (°C)         | 70                       |
| Presión (bar)            | 1.0                      |
| Número de puntos         | 100                      |

**Properties**

All Items

- Component Attributes
  - Henry Comps
  - UNIFAC Groups
- Polymers
- Methods
  - Specifications**
  - Selected Methods
  - Parameters
  - Routes
  - NC Props
  - Tabpoly
- Chemistry
- Property Sets
- Data
- Estimation
- Analysis
  - BINRY-1
    - Input
  - BINRY-2
    - Input
- Customize
- Results

**Properties**

**Methods - Specifications** | BINRY-2 (Binary) - T-xy - Plot | BINRY-2 (BINARY) - y-x - Plot

☒ Global | Flowsheet Sections | Referenced | Comments

Property methods & options

Method filter: **COMMON**

Base method: **WILSON**

Henry components: **Wilson with Ideal gas and Henry's law.**

Method name: **WILSON** [Methods Assistant...]

☐ Modify

Petroleum calculation options

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

Water solubility: **3**

Electrolyte calculation options

Chemistry ID:

☒ Use true components

Data set: **1**

Liquid gamma: **GMWILSON**

Data set: **1**

Liquid molar enthalpy: **HLMX85**

Liquid molar volume: **VLMX01**

☒ Heat of mixing

☐ Poynting correction

☐ Use liquid reference state enthalpy

**Properties**

All Items

- Component Attributes
  - Henry Comps
  - UNIFAC Groups
- Polymers
- Methods
  - Specifications
  - Selected Methods
  - Parameters
  - Routes
  - NC Props
  - Tabpoly
- Chemistry
- Property Sets
- Data
- Estimation
- Analysis
  - BINRY-1
    - Input
  - BINRY-2
    - Input
- Customize
- Results

**Properties**

**BINRY-1 (BINARY) - Input** | BINRY-2 (Binary) - T-xy - Plot | BINRY-2 (BINARY) - y-x - Plot | BIN

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

Analysis type: **Pxy**

Components

Component 1: **ETHAN-01**

Component 2: **WATER**

Pseudo-Binary

☐ Pseudo-binary system

Entrainer:

Entrainer fraction:

Compositions

Basis: **Mole fraction**

Vary: **ETHAN-01**

☒ Equidistant ☐ Logarithmic ☐ List of values

Start point: **0**

End point: **1**

☒ Number of intervals: **100**

☐ Increment: **0.01**

Temperature

Units: **C**

☐ Equidistant ☒ List of values

Enter Values: **70**

**Run Analysis**

**Properties**

All Items

- Component Attributes
  - Henry Comps
  - UNIFAC Groups
- Polymers
- Methods
  - Specifications
  - Selected Methods
  - Parameters
  - Routes
  - NC Props
  - Tabpoly
- Chemistry
- Property Sets
- Data
- Estimation
- Analysis
  - BINRY-1
    - Input
  - BINRY-2
    - Input
- Customize
- Results

**Properties**

**BINRY-2 (BINARY) - Input**

BINRY-2 (Binary) - T-xy - Plot   BINRY-2 (BINARY) - y-x - Plot   BINRY-2 (BINARY) - Activity Coeff. - Plot   BINRY-2 (BINARY) - K-values - Plot

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

Analysis type: **Txy**

Components

Component 1: **ETHAN-01**

Component 2: **WATER**

Pseudo-Binary

☐ Pseudo-binary system

Entrainer:

Entrainer fraction:

Compositions

Basis: **Mole fraction**

Vary: **ETHAN-01**

☒ Equidistant   ☐ Logarithmic   ☐ List of values

Start point:

End point:

☒ Number of intervals:

☐ Increment:

Pressure

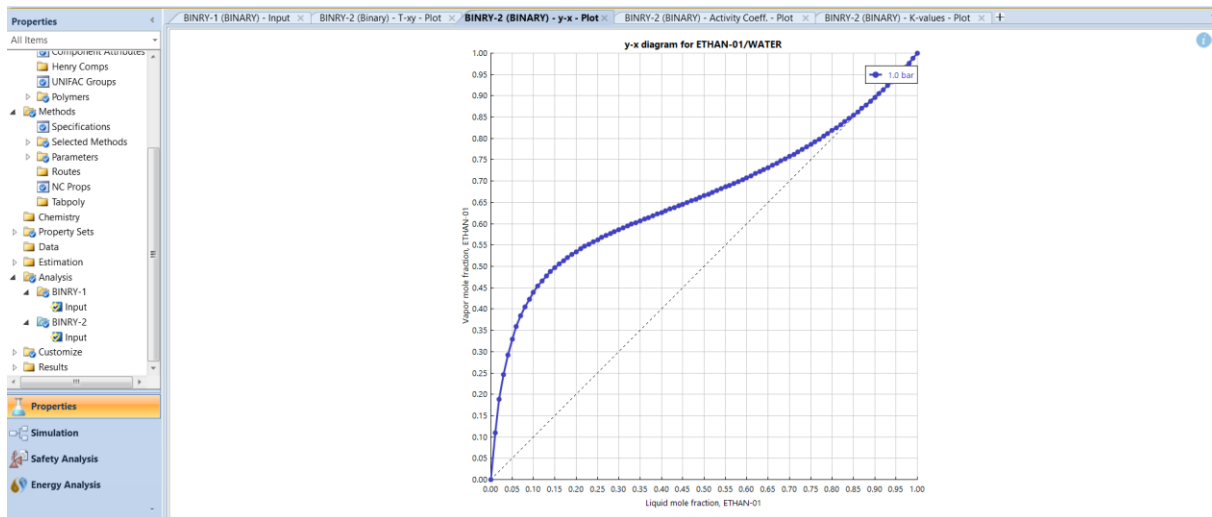
Units: **bar**

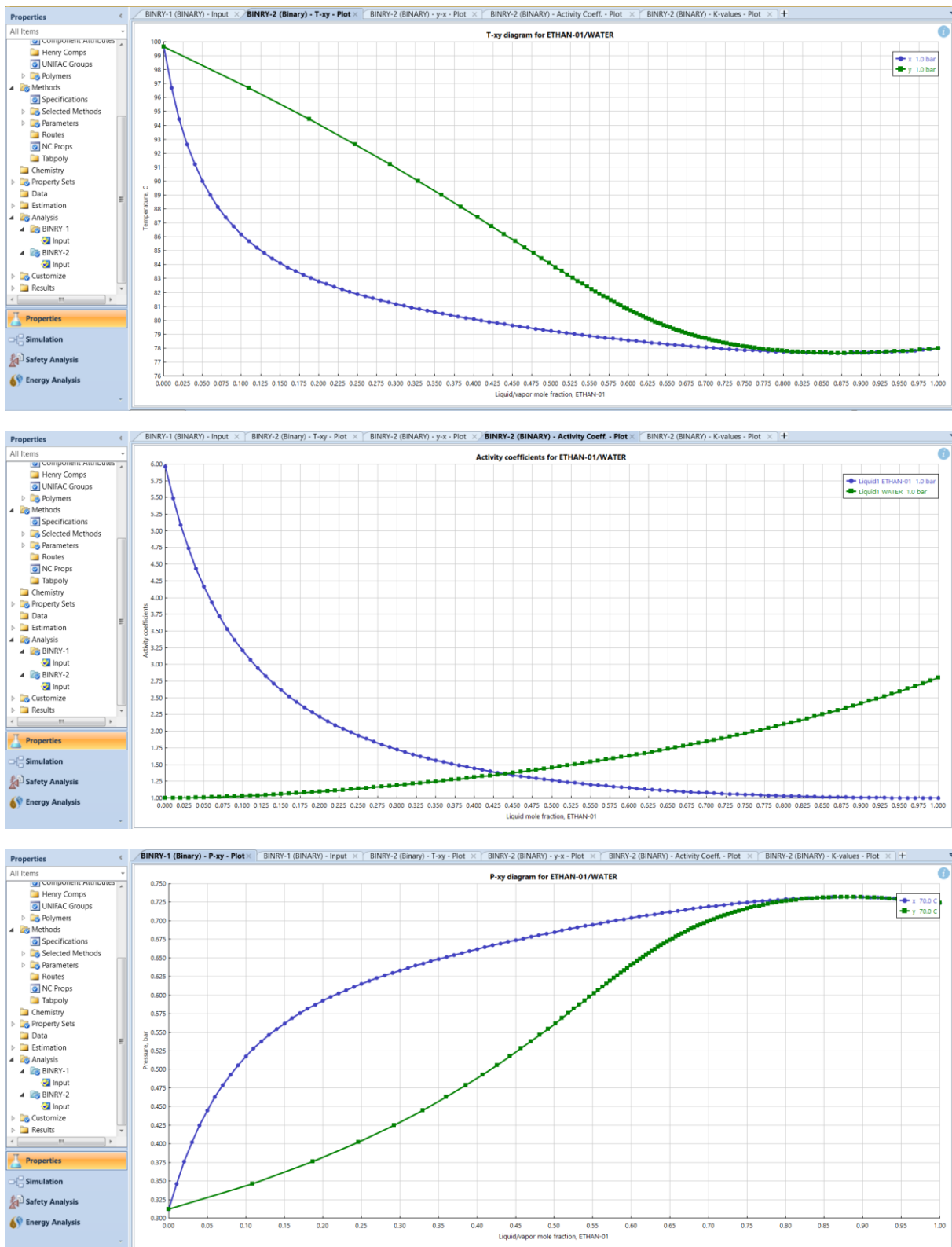
☐ Equidistant   ☒ List of values

Enter Values

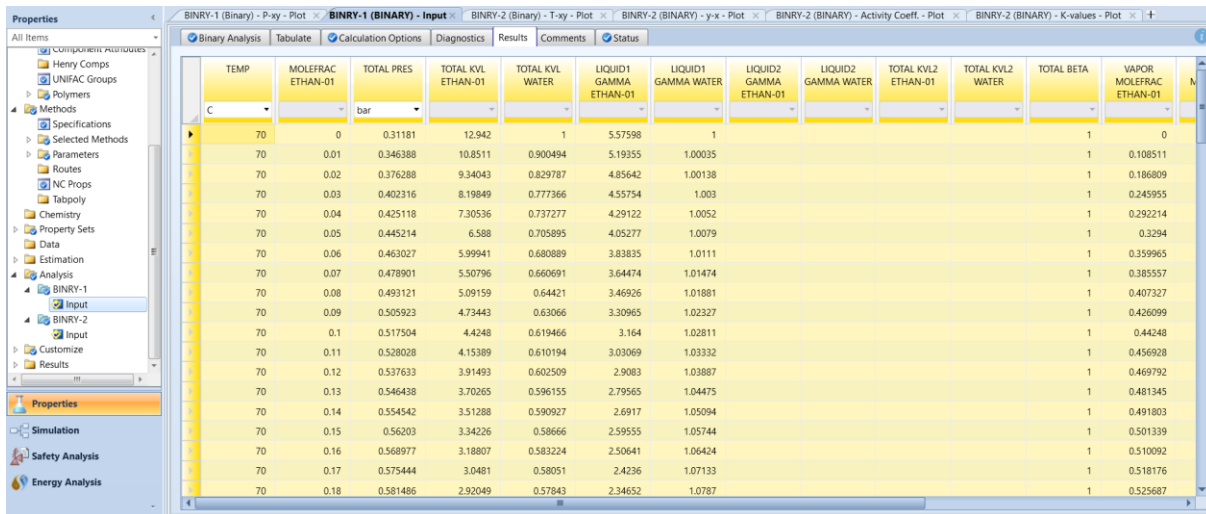
**Run Analysis**

Las curvas obtenidas fueron las siguientes:

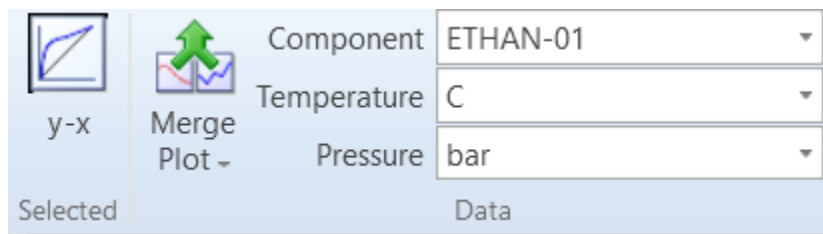




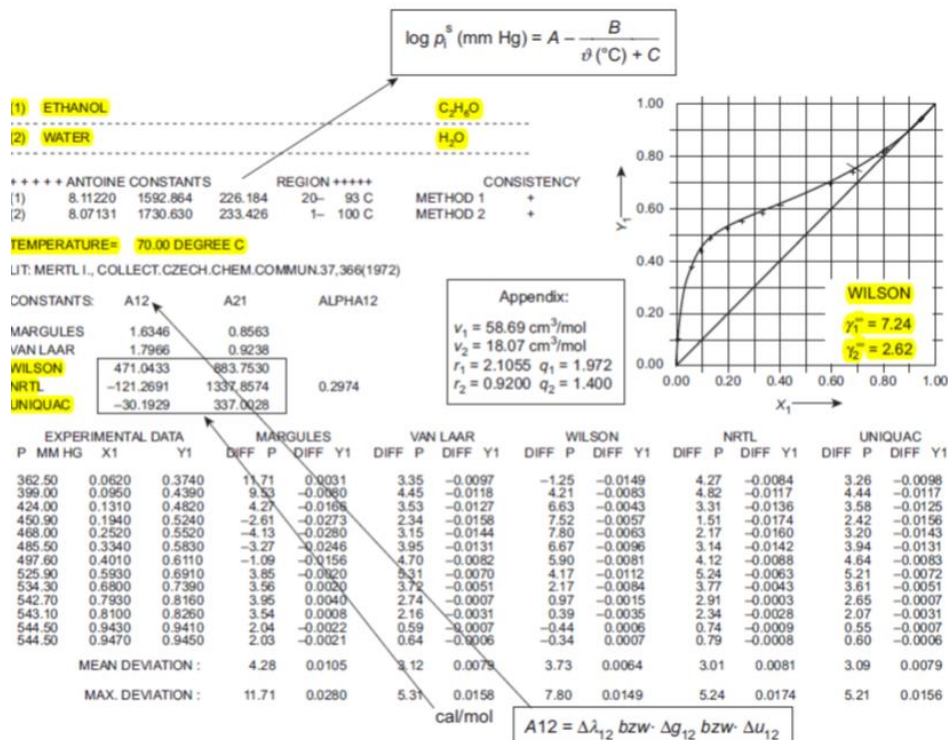
Los datos de los resultados se pueden desplegar en la pestaña “Results” en las carpetas “Analysis\BINRY-1\Input” y “Analysis\BINRY-2\Input”.



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

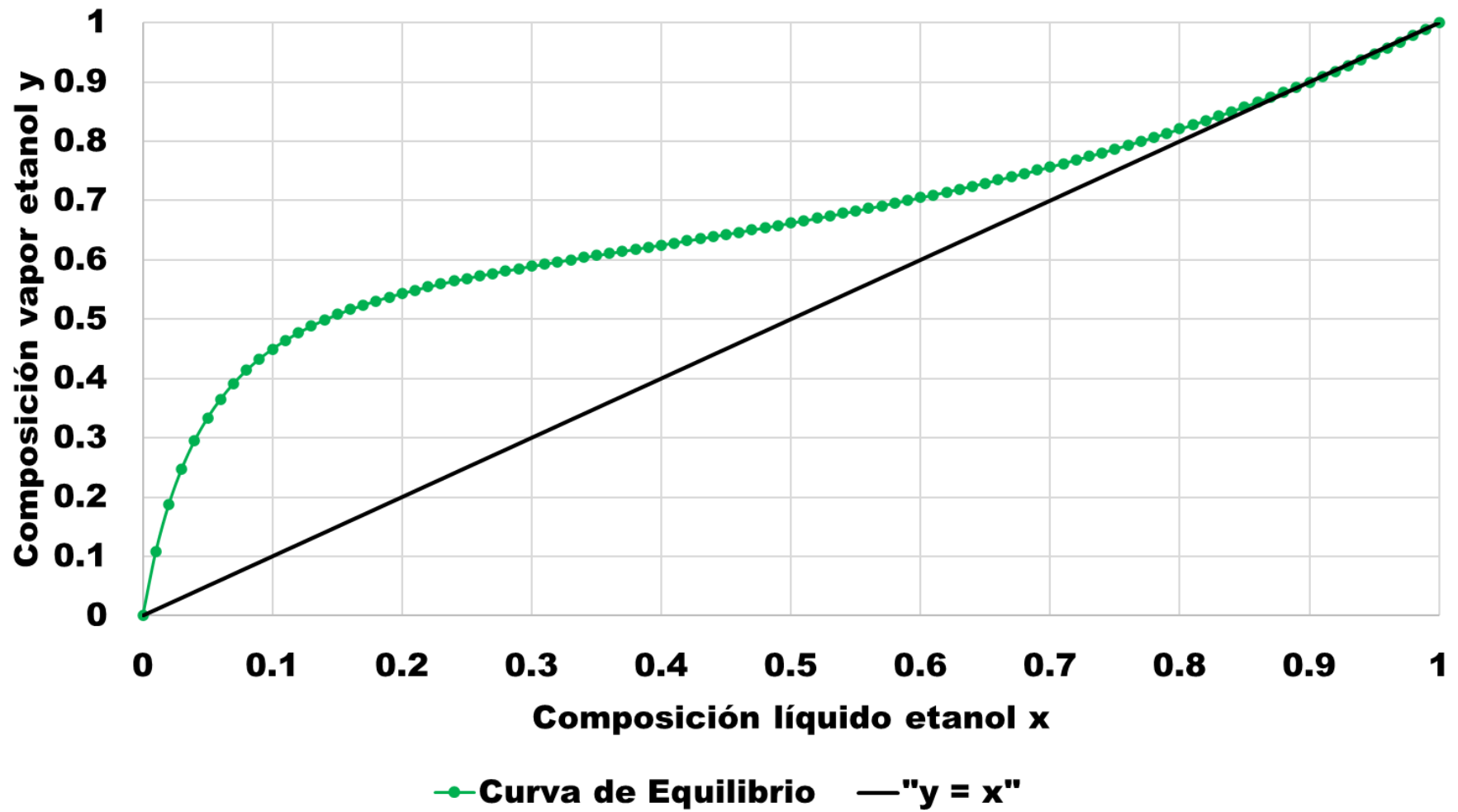


En ejemplo del libro se observa estos datos y diagrama:

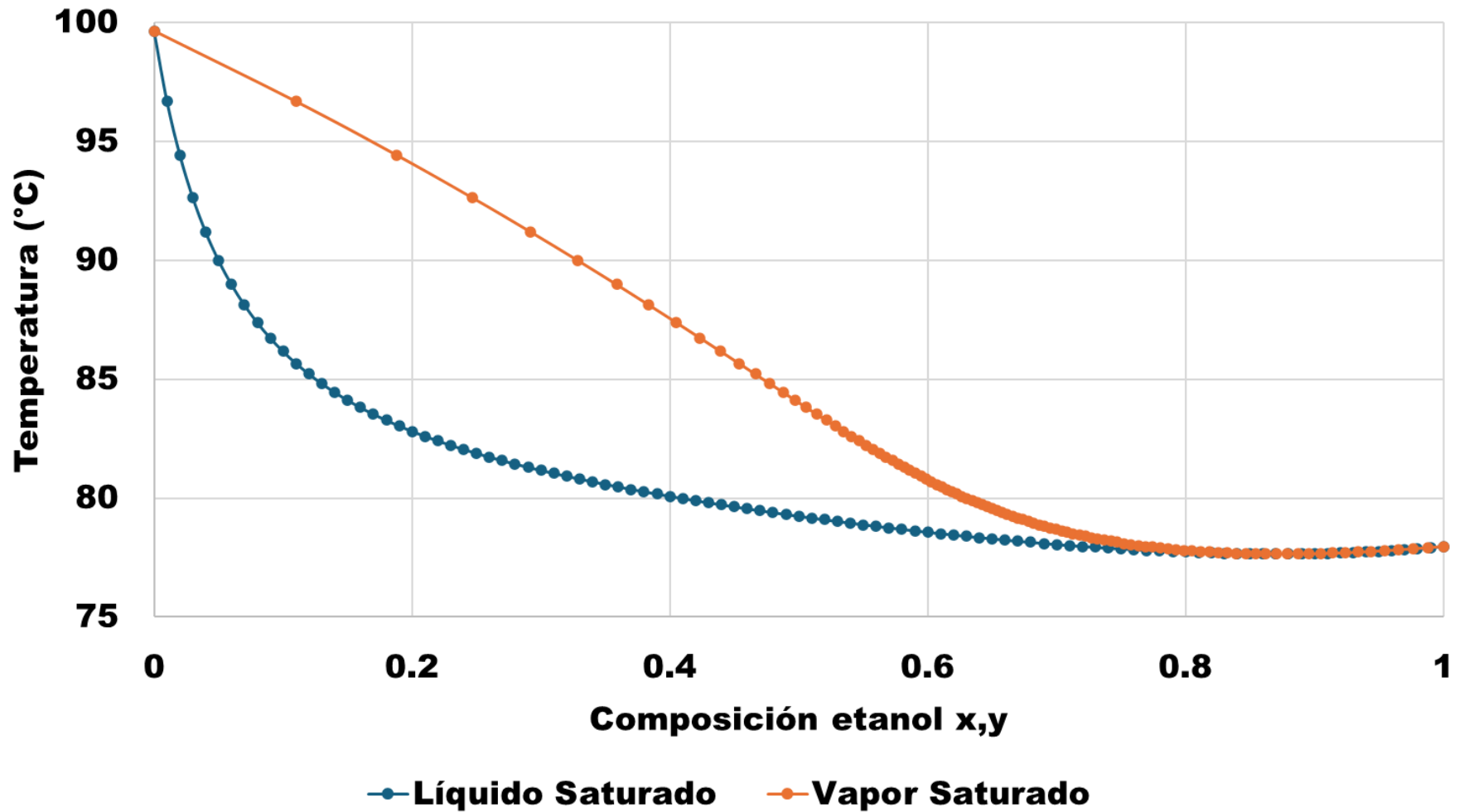


Los datos se pueden seleccionar y copiar a una hoja en Excel. Al comparar la curva y vs x vemos la reproducibilidad entre lo reportado en la literatura y lo obtenido en ASPEN Plus:

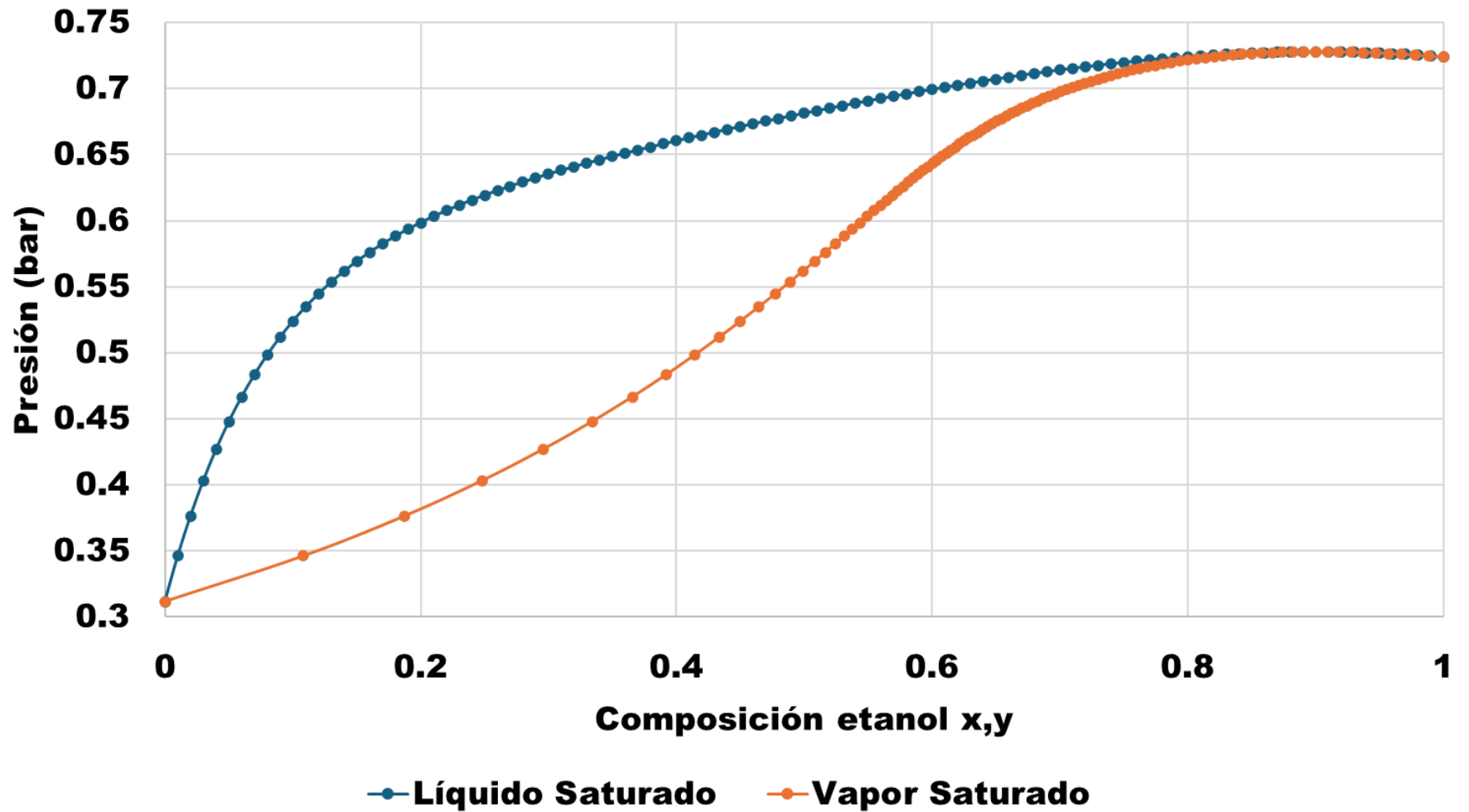
## Gráfico Txy etanol/agua



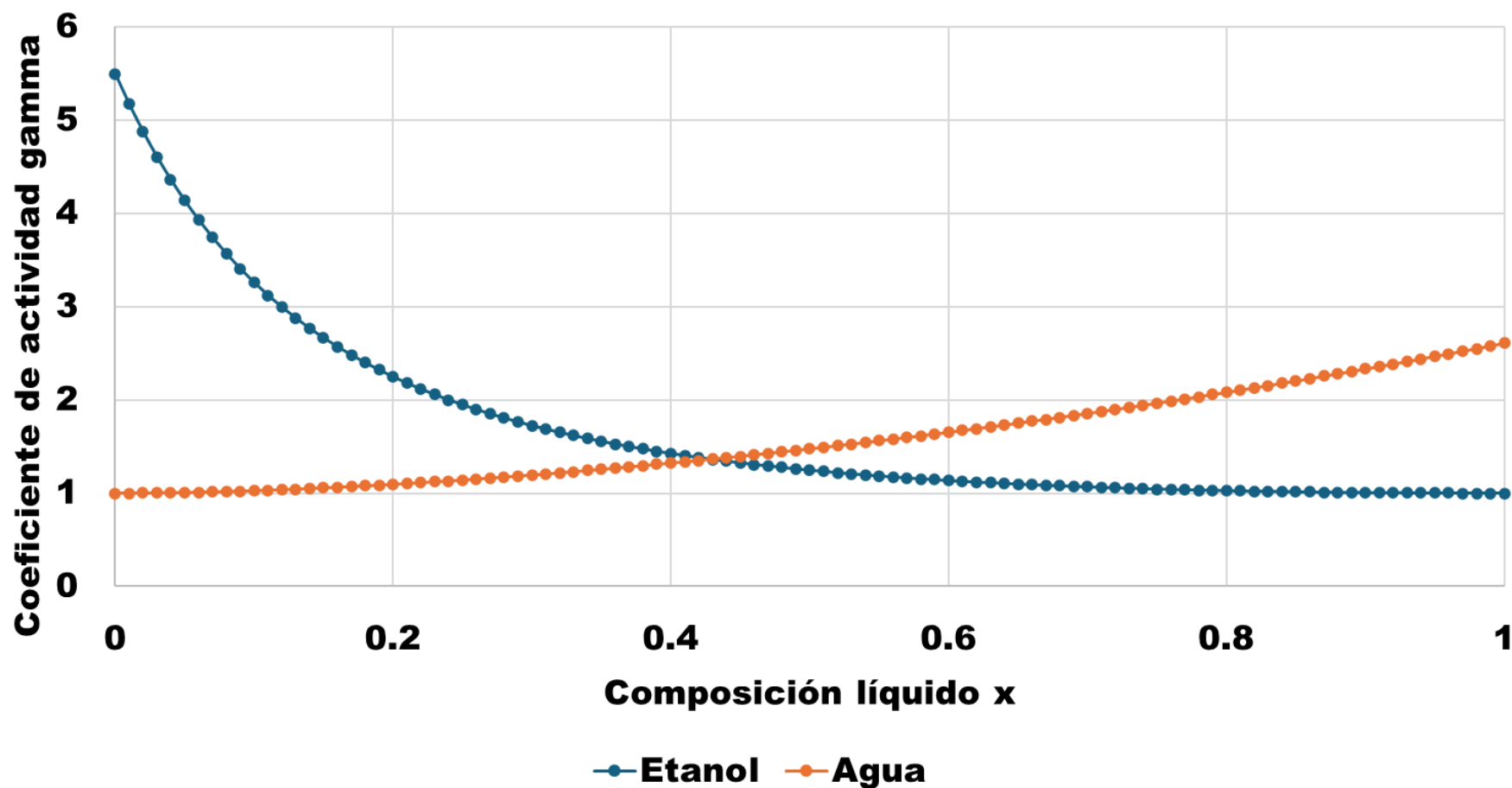
## Gráfico Txy etanol/agua



## Gráfico Txy etanol/agua



## Gráfico Coeficientes de Actividad Gamma vs Composición x etanol/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.
8. Gorak, A., & Sorensen, E. (2014). *Distillation: Fundamentals and Principles*. Academic Press.

### 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.

