

MANUALES DE ASPENONE. TERMODINÁMICA

Este documento describe la generación de una curva ternaria no ideal
de una mezcla de compuestos oxigenados.

DGAPA / PAPIME / PEI 103325

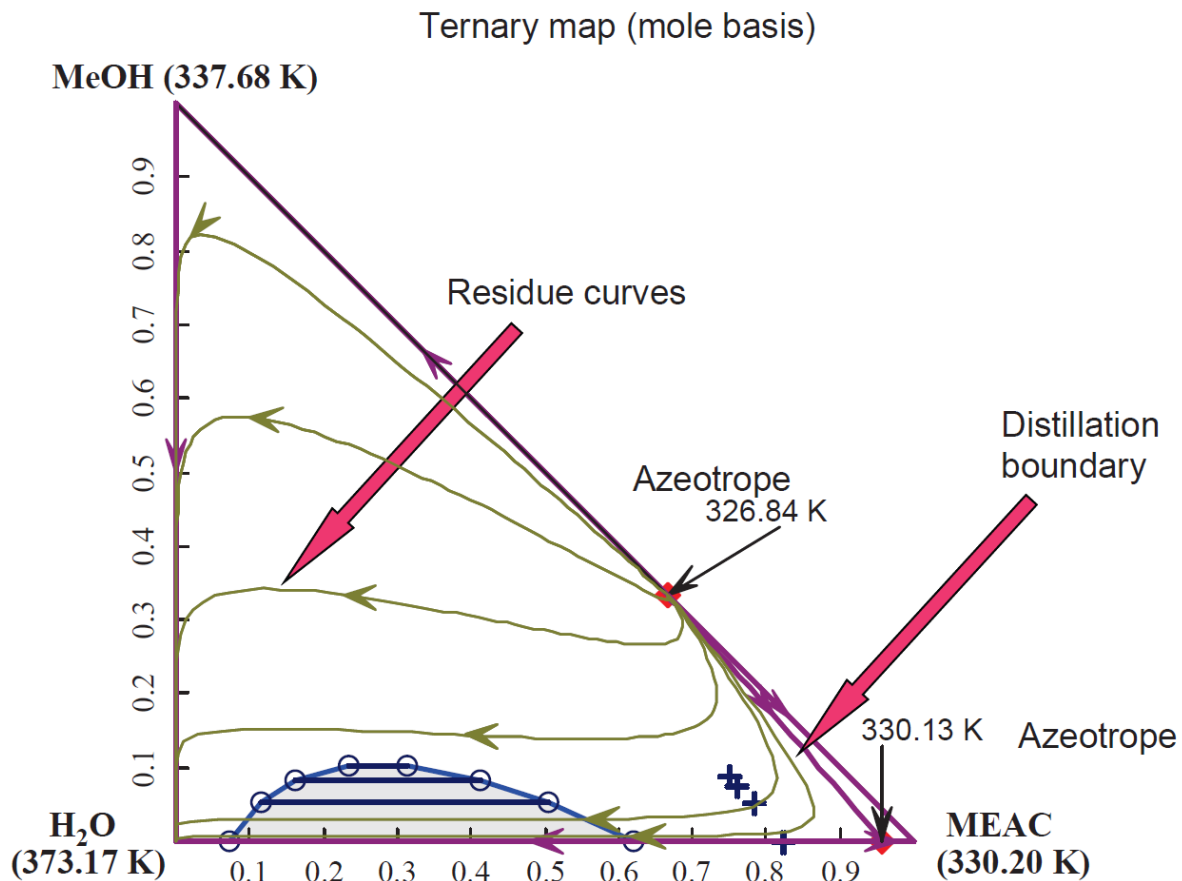
CURVA MEZCLA
TERNARIA NO
IDEAL

Curva ternaria mezcla no ideal de compuestos oxigenados.

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 ternarios brindan información del estado de la composición y temperatura de una mezcla de tres componentes.

Este ejemplo, genera una curva ternaria para una mezcla de acetato de metilo, metanol y agua. El ejercicio fue tomado del libro “Distillation design and control using Aspen simulation” de Luyben. En este libro se detalla la forma de como generar estas curvas para una mezcla no ideal. La imagen que se muestra es el diagrama resultante obtenido de una antigua versión de Aspen Plus. A pesar de ello, los procedimientos de construcción de diagramas en ASPEN es casi la misma.



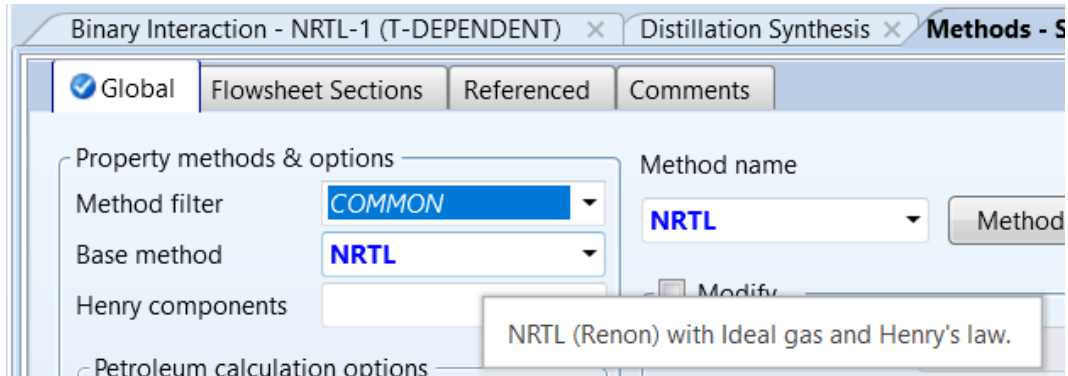
Para nuestro ejercicio los componentes considerados fueron acetato de metilo, metanol y agua.

Binary Interaction - NRTL-1 (T-DEPENDENT) × Distillation Synthesis × Components - Specifications × +				
Selection Petroleum Nonconventional Enterprise Database Comments				
Select components				
Component ID	Type	Component name	Alias	CAS number
METHY-01	Conventional	METHYL-ACETATE	C3H6O2-3	79-20-9
METHA-01	Conventional	METHANOL	CH4O	67-56-1
WATER	Conventional	WATER	H2O	7732-18-5
* Find Elec Wizard SFE Assistant User Defined Reorder Review				

Las condiciones para obtener las curvas fueron las siguientes:

Condición	Valor o Modelo
Ecuación de Estado	NRTL
Fases por considerar	Líquido-Líquido-Vapor
Presión (Pa)	101,325
Calcula	Azeótropos Curva residual Límites para la destilación

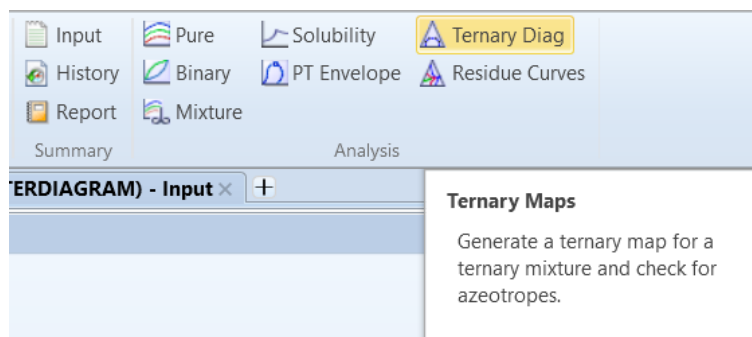
La ecuación empleada es la de NRTL para este tipo de componentes.



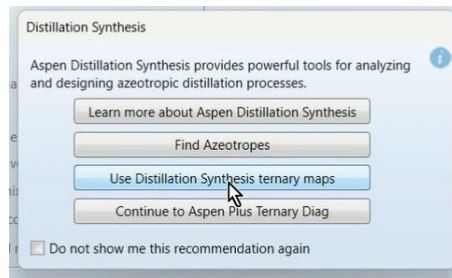
Para NRTL se despliegan una serie de parámetros que se deben verificar antes de proseguir:

Binary Interaction - NRTL-1 (T-DEPENDENT) × Distillation Synthesis × Methods - Specifications × +														
Input Databanks Comments Parameter: NRTL Help Data set: 1 Swap Enter Dechema Format Estimate using UNIFAC View Regression Information Search BIP Completeness														
Temperature-dependent binary parameters														
Component i	Component j	Source	Temp. Units	A1J	A2J	B1J	B2J	C1J	D1J	E1J	E2J	F1J	F2J	
METHY-01	METHA-01	APV121 VLE-IG	C	0	0	234.866	130.505	0.3	0	0	0	0	0	
METHY-01	WATER	APV121 VLE-IG	C	-2.9297	3.5222	1245.62	-307.203	0.35	0	0	0	0	0	
METHA-01	WATER	APV121 VLE-IG	C	-0.693	2.7322	172.987	-617.269	0.3	0	0	0	0	0	

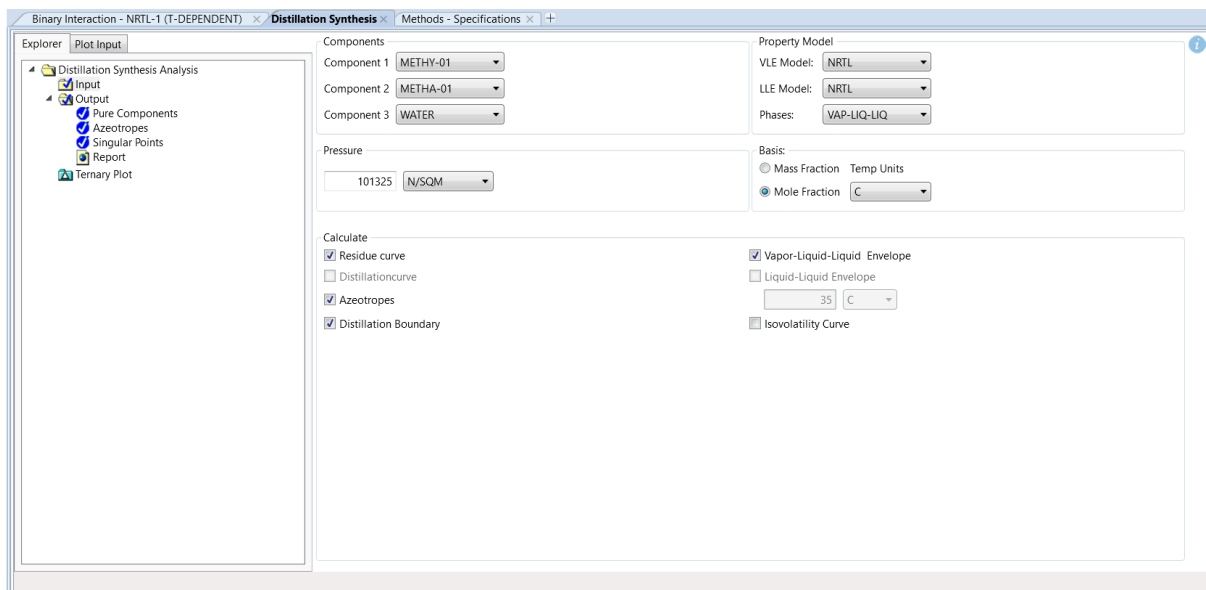
Una vez completados todos los datos de inicio, nos dirigimos al menú de “Analysis” y seleccionamos el botón de “Ternary Diag” o “Ternary Maps”.



Este botón nos generará una ventana emergente con distintos botones. Seleccionaremos aquel que dice “Use Distillation Synthesis ternary maps”.



Esto desplegará una pestaña denominada “Distillation Syntesis”, en la cual seleccionamos la carpeta “Distillation Syntesis Analysis\Input”. Lo primero que se observa son los componentes los cuales se les ordenará conforme a la numeración que uno decida. En ella se define que ecuación o ecuaciones se emplean en cada región VLE (vapor – liquid – equilibrium), LLE (liquid – liquid – equilibrium). Además de las fases a calcular. También muestra casillas de llenado, las cuales indican que es lo que se puede calcular, la curva residual, los puntos de azeótropo y el límite de destilación.



Si seleccionamos la carpeta “Distillation Syntesis Analysis\Output” se desplegará otra información en la pantalla con datos de temperatura de ebullición de los componentes puros, análisis de los puntos extremos del diagrama, y esta si contiene azeótropos, los cuales lo calcula en cada mezcla binaria.

Binary Interaction - NRTL-1 (T-DEPENDENT)Distillation SynthesisMethods - Specifications +

ExplorerPlot Input

Distillation Synthesis Analysis

- Input
- Output
 - Pure Components
 - Azeotropes
 - Singular Points
 - Report
- Ternary Plot

Component	Temp (C)	Classification
1 METHY-01	57.054	Stable node
2 METHA-01	64.535	Saddle
3 WATER	100.018	Stable node

Binary Interaction - NRTL-1 (T-DEPENDENT)Distillation SynthesisMethods - Specifications +

ExplorerPlot Input

Distillation Synthesis Analysis

- Input
- Output
 - Pure Components
 - Azeotropes
 - Singular Points
 - Report
- Ternary Plot

Temp (C)	Classification	Type	No. Comp.	METHY-01	METHA-01	WATER	
1	53.618	Unstable node	Homogeneous	2	0.668	0.332	0.000
2	56.982	Saddle	Homogeneous	2	0.959	0.000	0.041

Binary Interaction - NRTL-1 (T-DEPENDENT)Distillation SynthesisMethods - Specifications +

ExplorerPlot Input

Distillation Synthesis Analysis

- Input
- Output
 - Pure Components
 - Azeotropes
 - Singular Points
 - Report
- Ternary Plot

Temp (C)	Classification	Type	No. Comp.	METHY-01	METHA-01	WATER	
1	57.054	Stable node	Homogeneous	1	1.000	0.000	0.000
2	64.535	Saddle	Homogeneous	1	0.000	1.000	0.000
3	100.018	Stable node	Homogeneous	1	0.000	0.000	1.000
4	53.618	Unstable node	Homogeneous	2	0.668	0.332	0.000
5	56.982	Saddle	Homogeneous	2	0.959	0.000	0.041

Se genera también un reporte por la presencia de azeótropos:

AZEOTROPE SEARCH REPORT

Physical Property Model: NRTL Valid Phase: VAP-LIQ-LIQ

Mixture Investigated For Azeotropes At A Pressure Of 101325 N/SQM

Comp ID	Component Name	Classification	Temperature
METHY-01	METHYL-ACETATE	Stable node	57.05 C
METHA-01	METHANOL	Saddle	64.53 C
WATER	WATER	Stable node	100.02 C

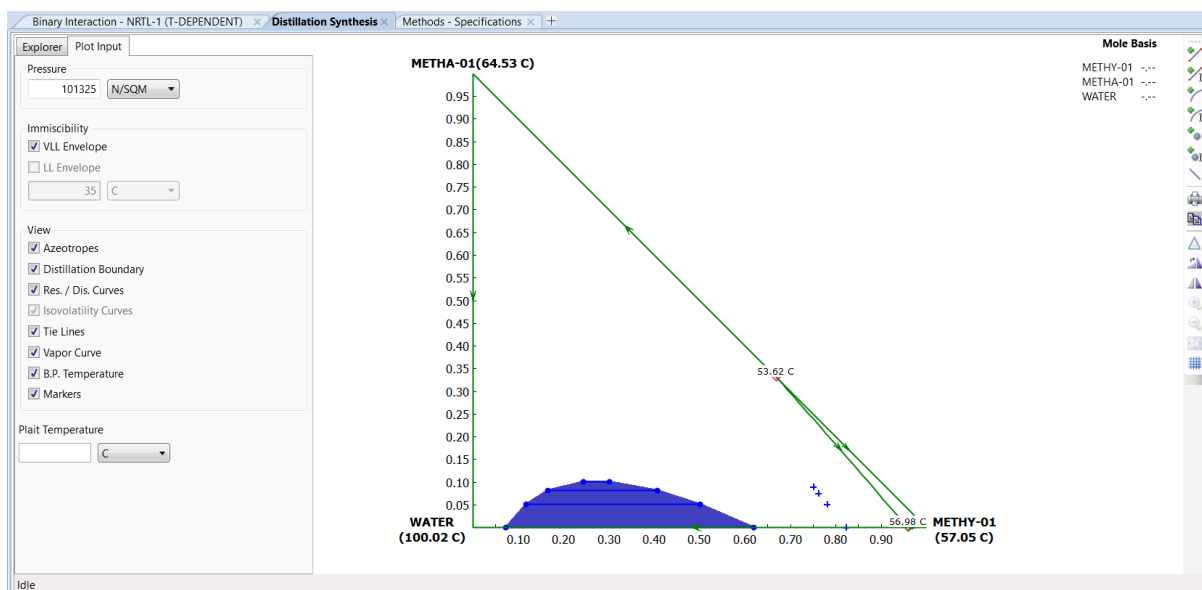
2 Azeotropes found

01	Number Of Components: 2		Temperature 53.62 C
	Homogeneous		Classification: Unstable node
		MOLE BASIS	MASS BASIS
	METHY-01	0.6682	0.8232
	METHA-01	0.3318	0.1768

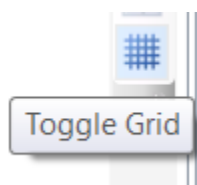
02	Number Of Components: 2		Temperature 56.98 C
	Homogeneous		Classification: Saddle
		MOLE BASIS	MASS BASIS
	METHY-01	0.9595	0.9898
	WATER	0.0405	0.0102

© Aspen Technology, Inc.

Una vez llenados estos campos, podemos seleccionar la carpeta “Ternary Plot” o la pestaña “Plot Input”. Se observará la siguiente pantalla:



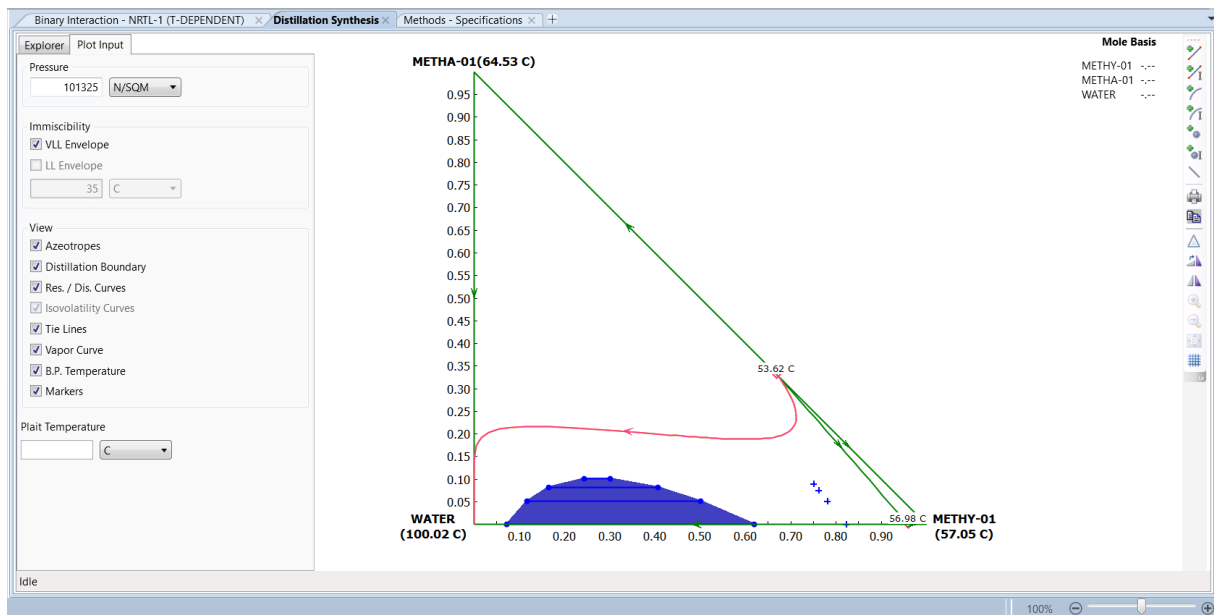
Añadimos una cuadrícula con el siguiente botón:



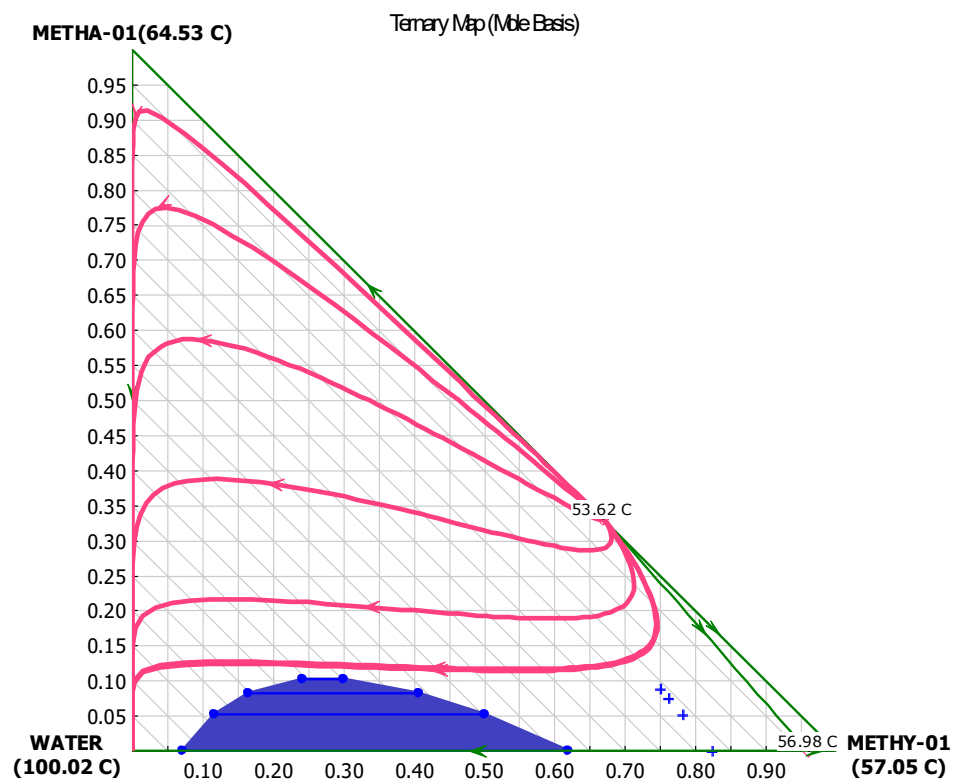
Para agregar líneas al diagrama podemos hacerlo con estos dos botones. Si se selecciona “Add Curve By Value” aparecerá una curva emergente para llenar con los datos de composición de una mezcla ternaria dada.



En ambos casos obtendremos líneas como la que describe la composición descrita en la ventana anterior:



Continuando así se pueden obtener el diagrama que se ve a continuación:



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.

