



INGENIERÍA
UNIVERSIDAD DE LOS ANDES
MÉRIDA VENEZUELA

SISTEMAS GAS - LIQUIDO: Simuladores de Propiedades Termodinámicas

Capítulo III

Curso: Fisicoquímica para Ingenieros

Prof. Silvia Margarita Calderón, PhD

Departamento de Química Industrial y Aplicada



Objetivos

- Aplicar los modelos de G^E para determinar el Equilibrio Líquido-Vapor de Sistemas Binarios usando un simulador de procesos como Aspen Plus Properties
- Realizar un análisis de regresión usando un modelo de G^E para describir los datos del Equilibrio Líquido-Vapor de un sistema binario a través de un simulador de procesos como Aspen Plus Properties

Aspen Properties Plus



Aspen Physical Property System



Es una herramienta computacional que permite la estimación de las propiedades de sustancias puras y sus mezclas (incluidos electrolitos) en relación a la temperatura, presión y composición usando modelos empíricos y semi-empíricos aceptados a nivel industrial

Permite estimar:

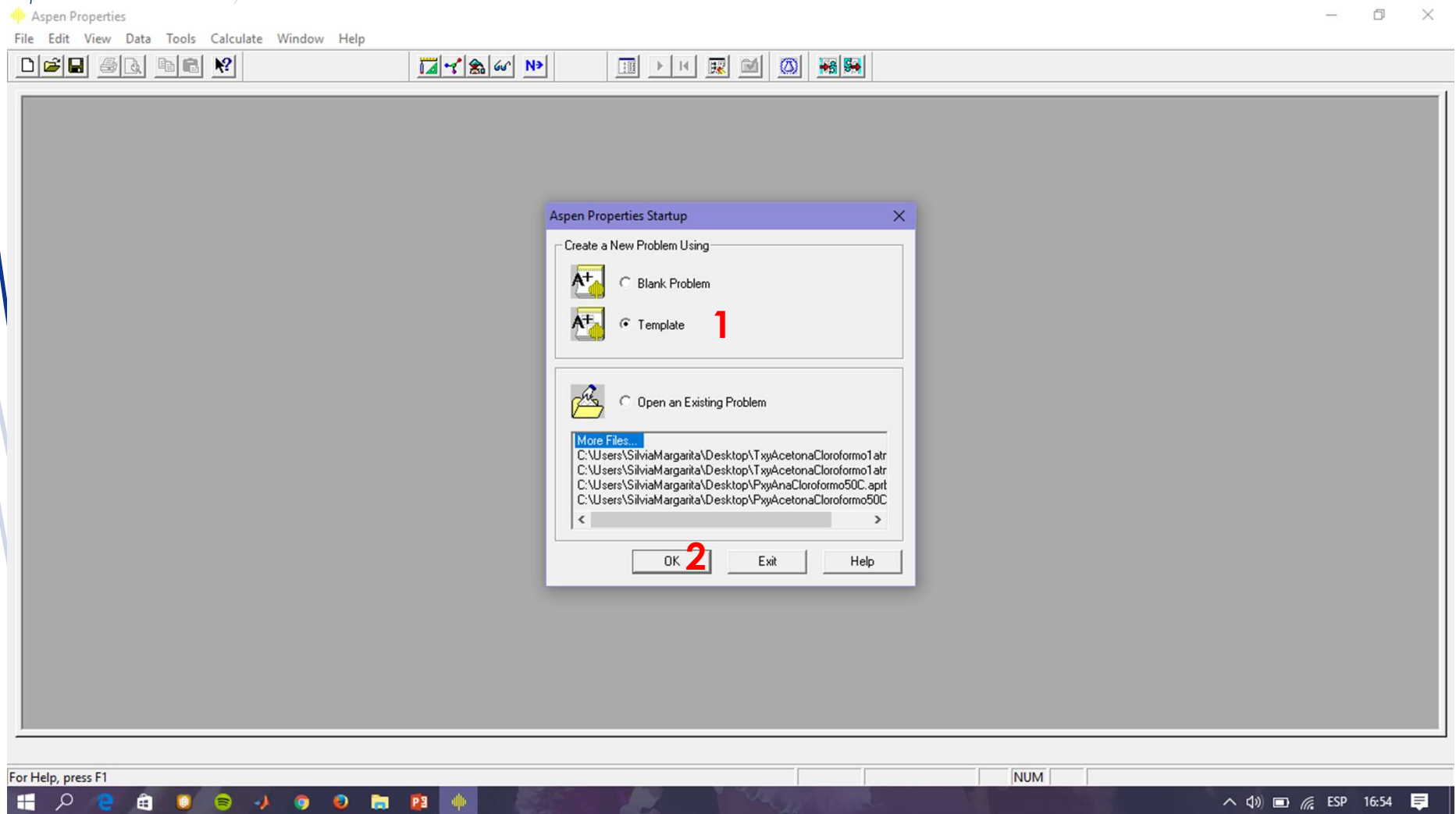
1. Propiedades asociadas a modelos termodinámicos
2. Propiedades asociadas a modelos de Transporte
3. Propiedades asociadas a modelos para sólidos no convencionales



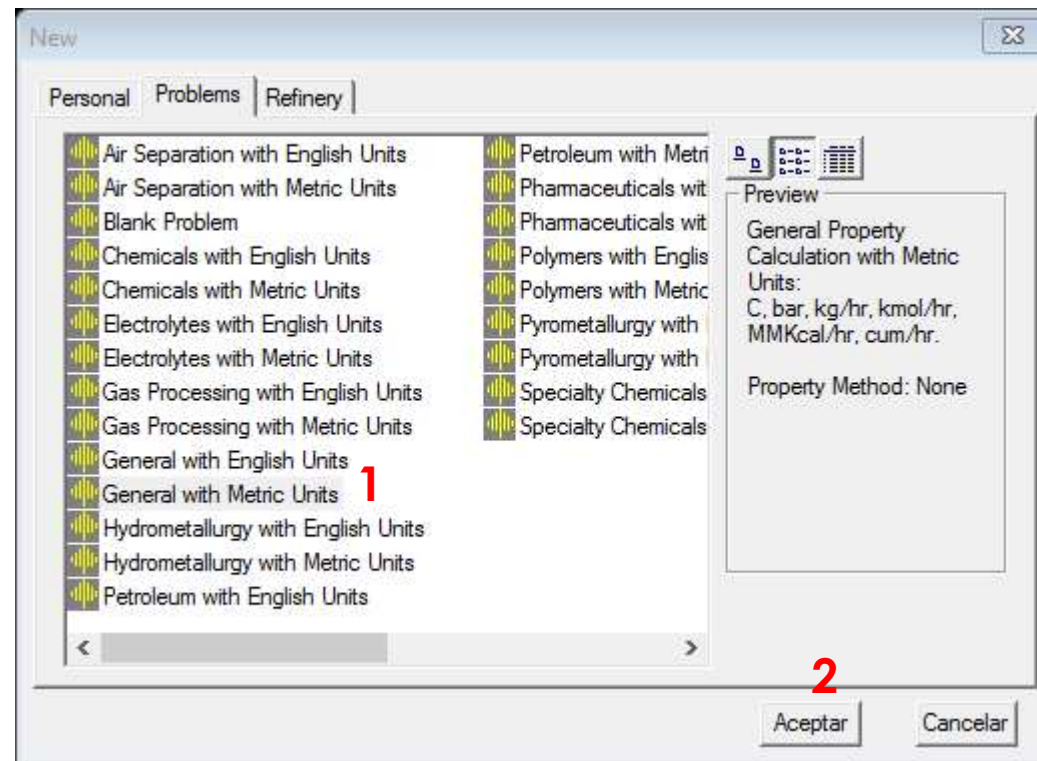
Determinación de los diagramas de fase para ELV

- Use el simulador Aspen Properties para estimar los diagramas de fase: T vs. x, y , y vs. x , Γ vs. x , G vs. x a $25\text{ }^{\circ}\text{C}$ y $63\text{ }^{\circ}\text{C}$ usando el modelo de Wilson para el sistema Acetona(1)-Cloroformo(2) en ELV a:
 - 610 mmHg
 - 760 mmHg

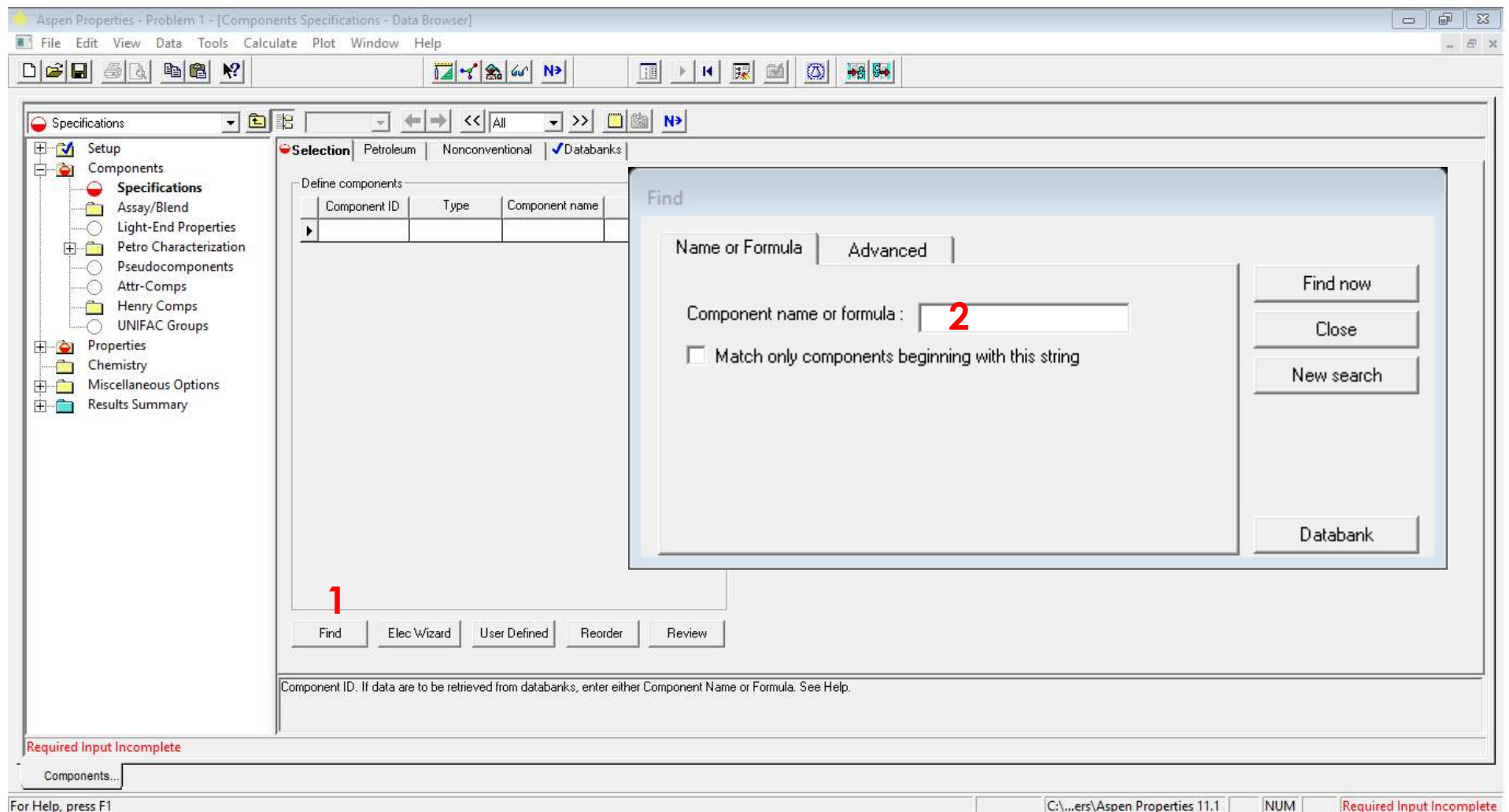
1. Abra una sesión de Aspen Properties, escoja la opción plantilla (**template**) y haga click en OK



Seleccione la opción:
General with Metric Units y pulse
el comando *Aceptar*



Deberá introducir los componentes usando la opción *Find*, y luego en la ventana emergente escribimos la fórmula o nombre del compuesto en *Component name or formula*



Find

Name or Formula Advanced

Component name or formula : **1**

☐ Match only components beginning with this string

Find now **2**

Close

New search

Luego de escribir
el nombre del
compuesto → *Find
now* →

Localizamos la
línea **ACETONE** y
seleccionamos
haciendo click en
Add

Find

Name or Formula Advanced

Component name or formula : **3**

☐ Match only components beginning with this string

4 Find now

Close

New search

Databank

Double click on component to add to list

Component name	Formula	Databank	MW	BP <C>	CAS no
ACETONE 5	C3H6O-1	PURE11	58.08	56.29	67-64-1
ACETYLACETONE	C5H8O2-D1	PURE11	100.117	140.4	123-54-6
ACETONE-CYANO...	C4H7NO-D1	PURE11	85.1057	170.85	75-86-5
HEXAFLUOROACE...	C3F6O	PURE11	166.023	-27.27	684-16-2
DIACETONE-ALCO...	C6H12O2-D3	PURE11	116.16	167.9	123-42-2
TRIACETONE-ALC...	C9H18O3	PURE11	174.24	212.85	3682-91-5

< >

Add **6**

Matches found : 6

Repetimos el procedimiento para Cloroformo y luego de hacer click en **Add** notaremos que aparecen ambos compuestos en la selección

The screenshot shows the Aspen Properties software interface. The 'Find' dialog box is open, displaying a list of components found. The 'Component name' column is highlighted, and 'CHLOROFORM' is selected. The 'Add' button is visible at the bottom of the dialog. The background window shows the 'Define components' table with 'ACETO-01' and 'CHLOR-01' listed.

Define components

Component ID	Type	Component name	Formula
ACETO-01	Conventional	ACETONE	C ₃ H ₆ O
CHLOR-01	Conventional	CHLOROFORM	CHCl ₃

Find

Name or Formula | Advanced

Component name or formula : chloroform

☐ Match only components beginning with this string

Find now

Close

New search

Databank

Double click on component to add to list

Component name	Formula	Databank	MW	BP <C>	CAS no
CHLOROFORM	CHCl ₃	PURE11	119.377	61.18	67-66-3
ETHYL-CHLOROFO...	C ₂ H ₅ ClO ₂ D1	PURE11	108.524	92.85	541-41-3
METHYL-CHLOROF...	C ₂ H ₃ ClO ₂ D1	PURE11	94.4973	70.85	79-22-1

Add

Matches found : 3

Component ID. If data are to be retrieved from databanks, enter either Component Name or Formula. See Help.

Input Complete

Components...

For Help, press F1

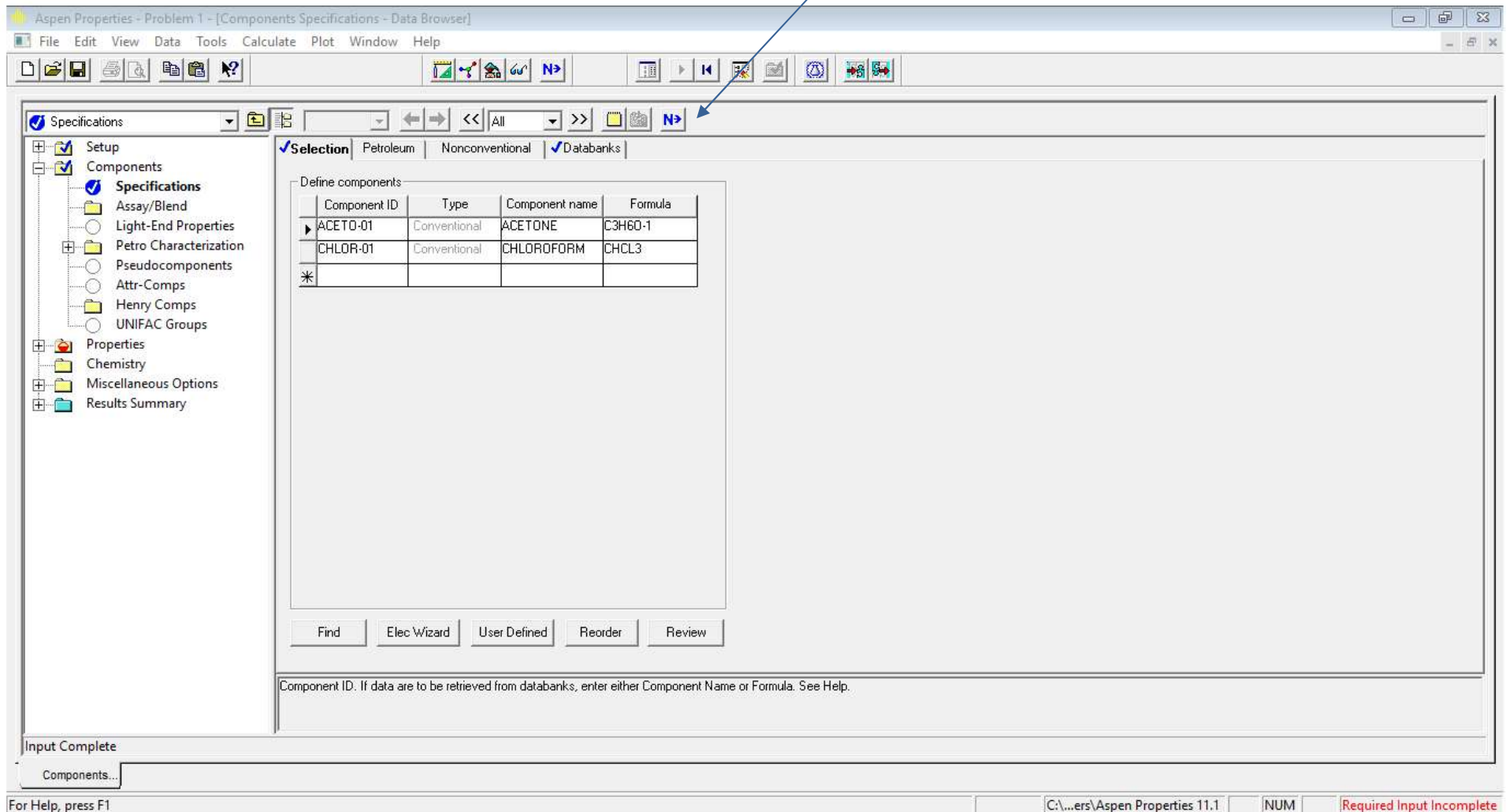
C:\...ers\Aspen Properties 11.1

NUM

Required Input Incomplete

ESP 17:10

Continuamos con la alimentación
de datos para la simulación
haciendo click en *Next*

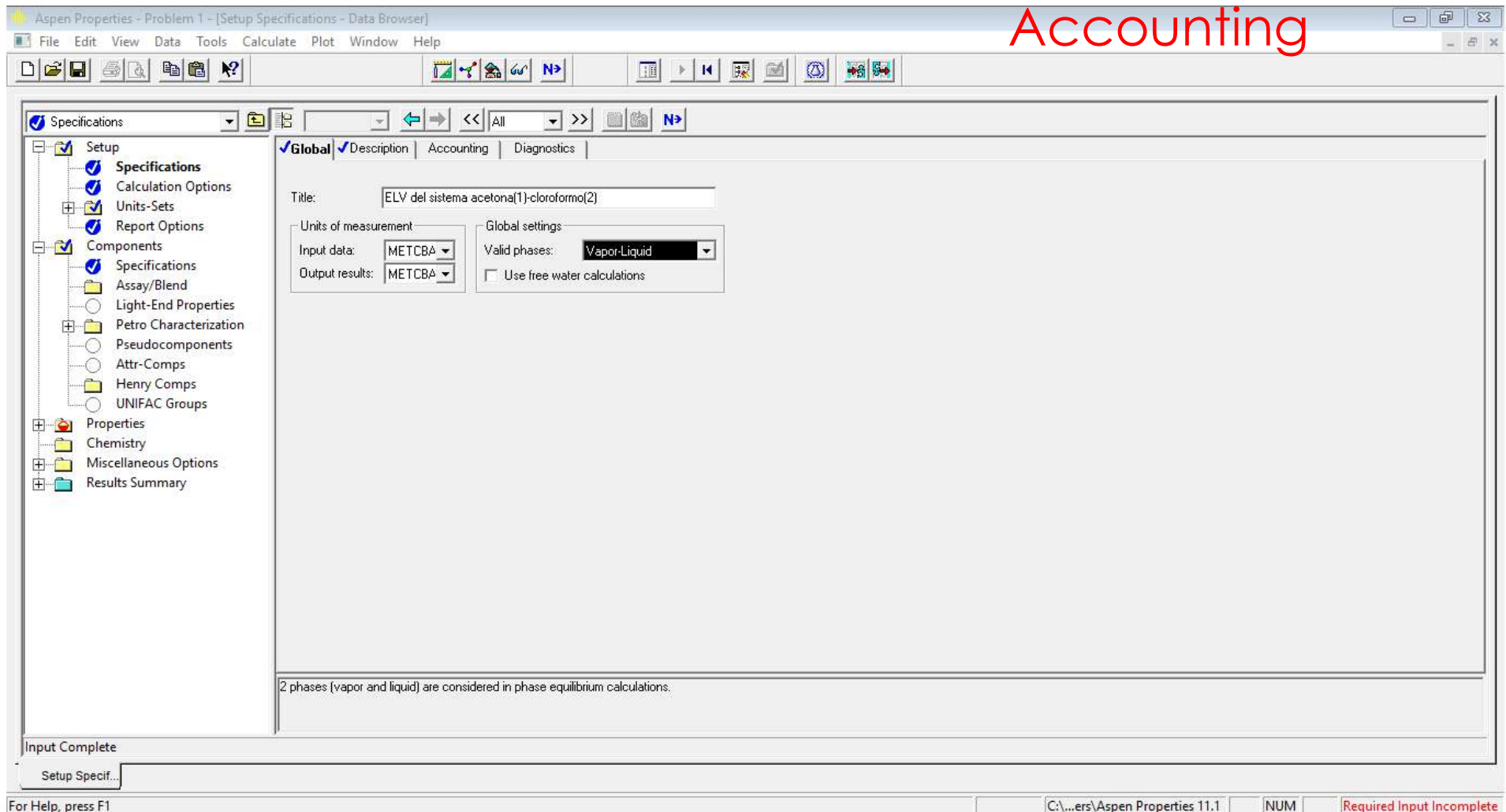


Indicamos el título de la simulación en *title* y las fases válidas en *Valid phases* →

Vapor-Liquid

Hacemos click sobre la pestaña

Accounting



Este paso es MUY IMPORTANTE no lo puedes obviar
Debes indicar los datos de identificación para la simulación que serán usados en el reporte final

Aspen Properties - Problem 1 - [Setup Specifications - Data Browser]

File Edit View Data Tools Calculate Plot Window Help

Specifications

- Setup
 - Specifications
 - Calculation Options
 - Units-Sets
 - Report Options
- Components
 - Specifications
 - Assay/Blend
 - Light-End Properties
 - Petro Characterization
 - Pseudocomponents
 - Attr-Comps
 - Henry Comps
 - UNIFAC Groups
- Properties
 - Chemistry
 - Miscellaneous Options
 - Results Summary

Global Description Accounting Diagnostics

Aspen Properties accounting information

User name: SILVIA M CALDERON

Account number: 1111

Project ID: A111

Project name: ELV ACETONA-CLOROFORMO

Luego click en *Next*

Input Complete

Setup Specif...

For Help, press F1

C:\...ers\Aspen Properties 11.1 NUM Required Input Incomplete

Procedemos a la selección del modelo termodinámico en **Base Method**
Usamos la opción **WILSON**

Debemos notar que al pulsar el menú desplegable y colocar el ratón sobre cualquier de las opciones, aparece la indicación del nombre del modelo en la ventana inferior

Luego hacemos click en **NEXT**

Wilson with Ideal gas and Henry's law.

For Help, press F1

C:\...ers\Aspen Properties 11.1

NUM

Required Input Incomplete

17:25

Aparecen los datos del modelo de Wilson existentes en la base de datos para el sistema

$$\ln \gamma_i = 1 - \ln \left(\sum_j A_{vj} x_j \right) - \sum_j \frac{A_{ji} x_j}{\sum_k A_{jk} x_k}$$

$$\ln A_{ij} = a_{ij} + b_{ij}/T + c_{ij} \ln T + d_{ij}T + e_{ij}/T^2$$

Aspen Properties - Problem 1 - [Properties Parameters Binary Interaction WILSON-1 (T-DEPENDENT) - Data Browser]

File Edit View Data Tools Calculate Plot Window Help

WILSON-1 METCBAR < > << All >> < > << >>

Setup

- Specifications
- Calculation Options
- Units-Sets
- Report Options
- Components
 - Specifications
 - Assay/Blend
 - Light-End Properties
 - Petro Characterization
 - Pseudocomponents
 - Attr-Comps
 - Henry Comps
 - UNIFAC Groups
- Properties
 - Specifications
 - Property Methods
 - Estimation
 - Molecular Structure
 - Parameters
 - Pure Component
 - Binary Interaction
 - ANDKIJ-1
 - ANDMIJ-1
 - HENRY-1
 - RKTKIJ-1
 - WILSON-1**
 - Electrolyte Pair
 - Electrolyte Ternary

Input Databanks

Parameter: WILSON Data set: 1

Temperature-dependent binary parameters

Component i	Component j	Temperature units	Source	A _{ij}	A _{ji}	B _{ij}	B _{ji}	C _{ij}	C _{ji}	D _{ij}	D _{ji}	TLOWER	TUPPER
ACETO-01	CHLOR-01	C	VLE-IG	-7683000000	-7191000000	262,1785000	435,1443000	0,0	0,0	0,0	0,0	15,00000000	64,47000000

☐ Estimate all missing parameters by UNIFAC

Input Complete

Properties P...

For Help, press F1

C:\...ers\Aspen Properties 11.1 NUM Required Input Complete

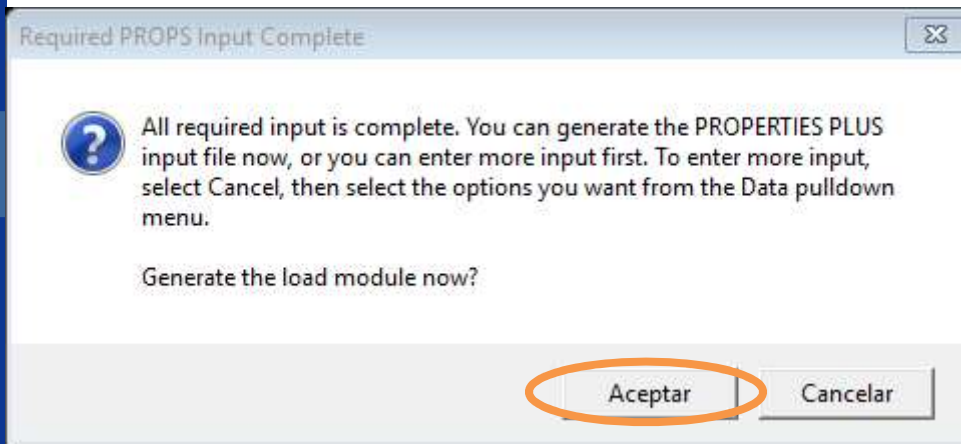
Hacemos click en **Next** y aparece una ventana emergente, y hacemos click en **OK**

Required Properties Input Complete

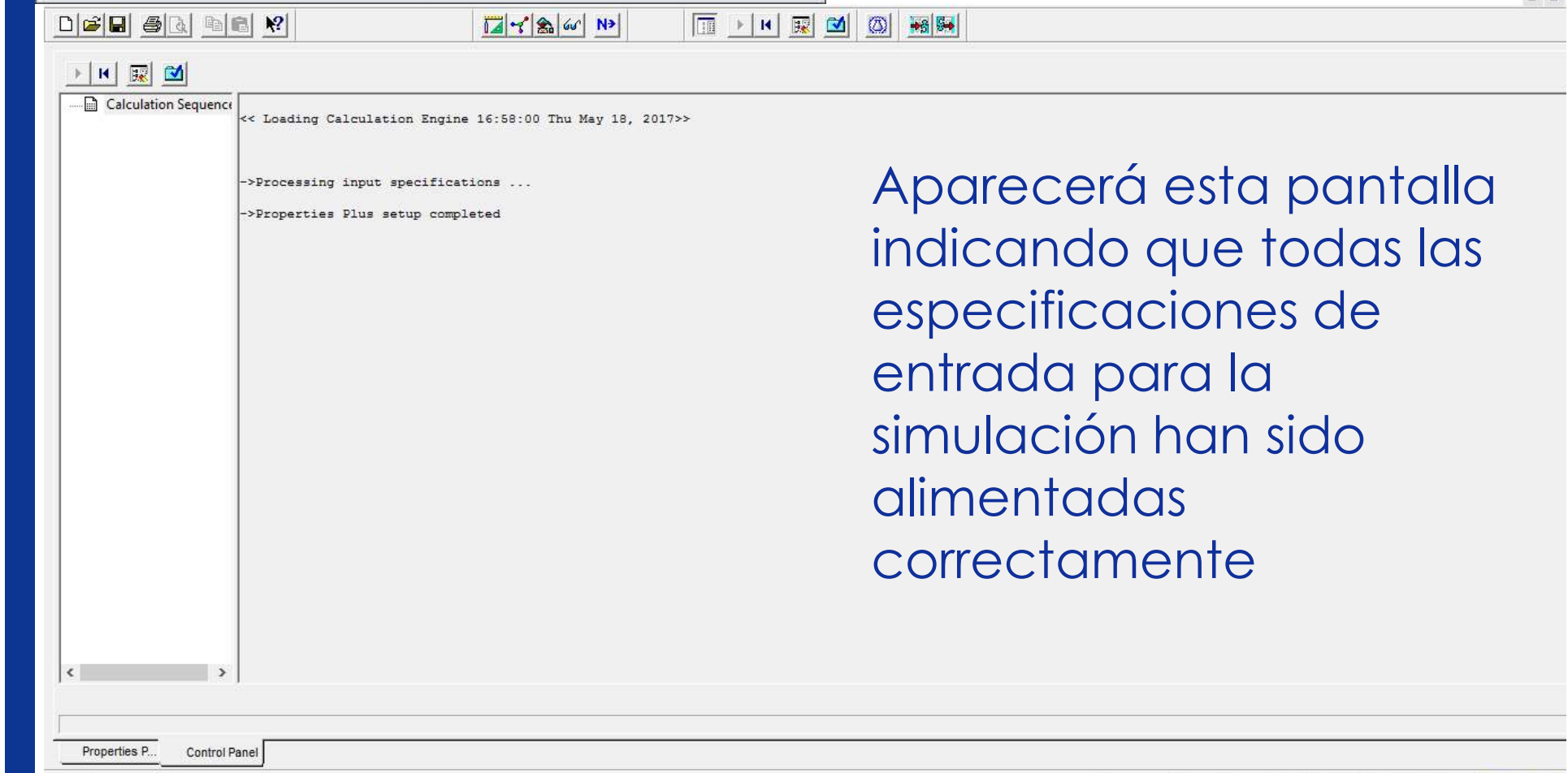
Go to the Next required step, or supply additional properties information.

- ☒ Go to Next required input step
- ☐ Modify required property specifications
- ☐ Enter property parameters
- ☐ Enter raw property data

OK Cancel



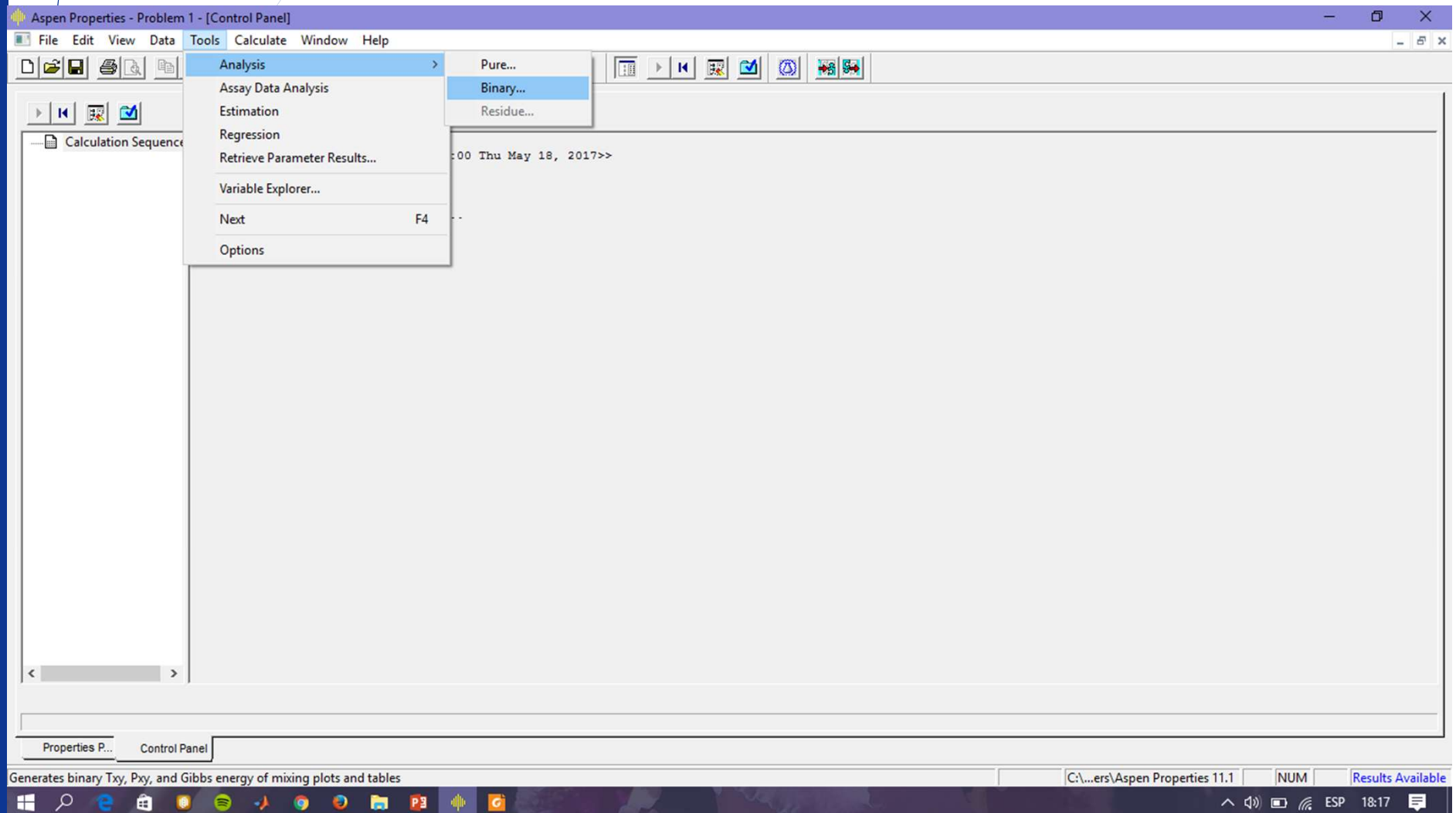
Aparecerá esta
primera ← ventana
emergente
Hacemos click en
Aceptar



Aparecerá esta pantalla
indicando que todas las
especificaciones de
entrada para la
simulación han sido
alimentadas
correctamente

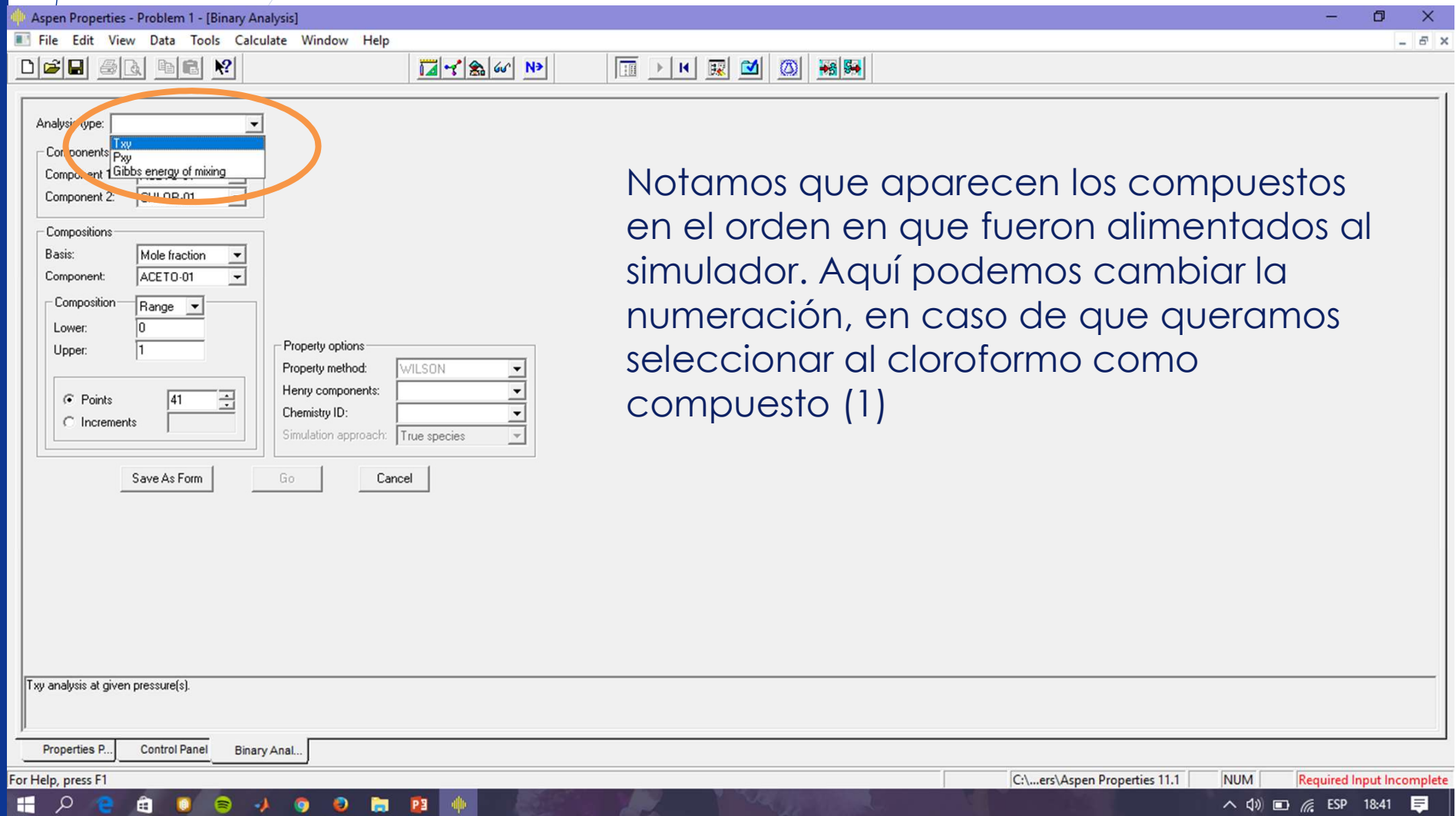
Para iniciar la construcción de los diagramas de ELV seleccionamos:

Tools → Analysis → Binary



Desplegamos la lista de opciones disponibles en *Analysis Type*, comenzamos por seleccionar *Txy*

Notamos que luego podemos volver a esta ventana para realizar el resto de diagramas: *Pxy* o *Gibbs energy of mixing*



Notamos que aparecen los compuestos en el orden en que fueron alimentados al simulador. Aquí podemos cambiar la numeración, en caso de que queramos seleccionar al cloroformo como compuesto (1)

Aspen Properties - Problem 1 - [Binary Analysis]

File Edit View Data Tools Calculate Window Help

Analysis type: Txy

Valid phases: Vapor-Liquid

Components:
Component 1: ACETO-01
Component 2: CHLOR-01

Compositions:
Basis: Mole fraction
Component: ACETO-01
Composition: Range
Lower: 0
Upper: 1
Points: 41
Increments: 0,01

Pressure: List mmHg
760
610
*

Property options:
Property method: WILSON
Henry components:
Chemistry ID:
Simulation approach: True species

Save As Form Go Cancel

1. Indicamos la unidad de composición en nuestro caso será la fracción molar usando como componente de referencia o (1) a la acetona
2. Indicamos el rango de composición a estudiar $x_1 = [0, 1]$
3. Indicamos el distanciamiento del vector de composición en 0,01
4. Indicamos las presiones a las cuales queremos ver el diagrama Txy
5. Notamos que el modelo de Wilson aparece seleccionado
6. Hacemos click en Go

Warning

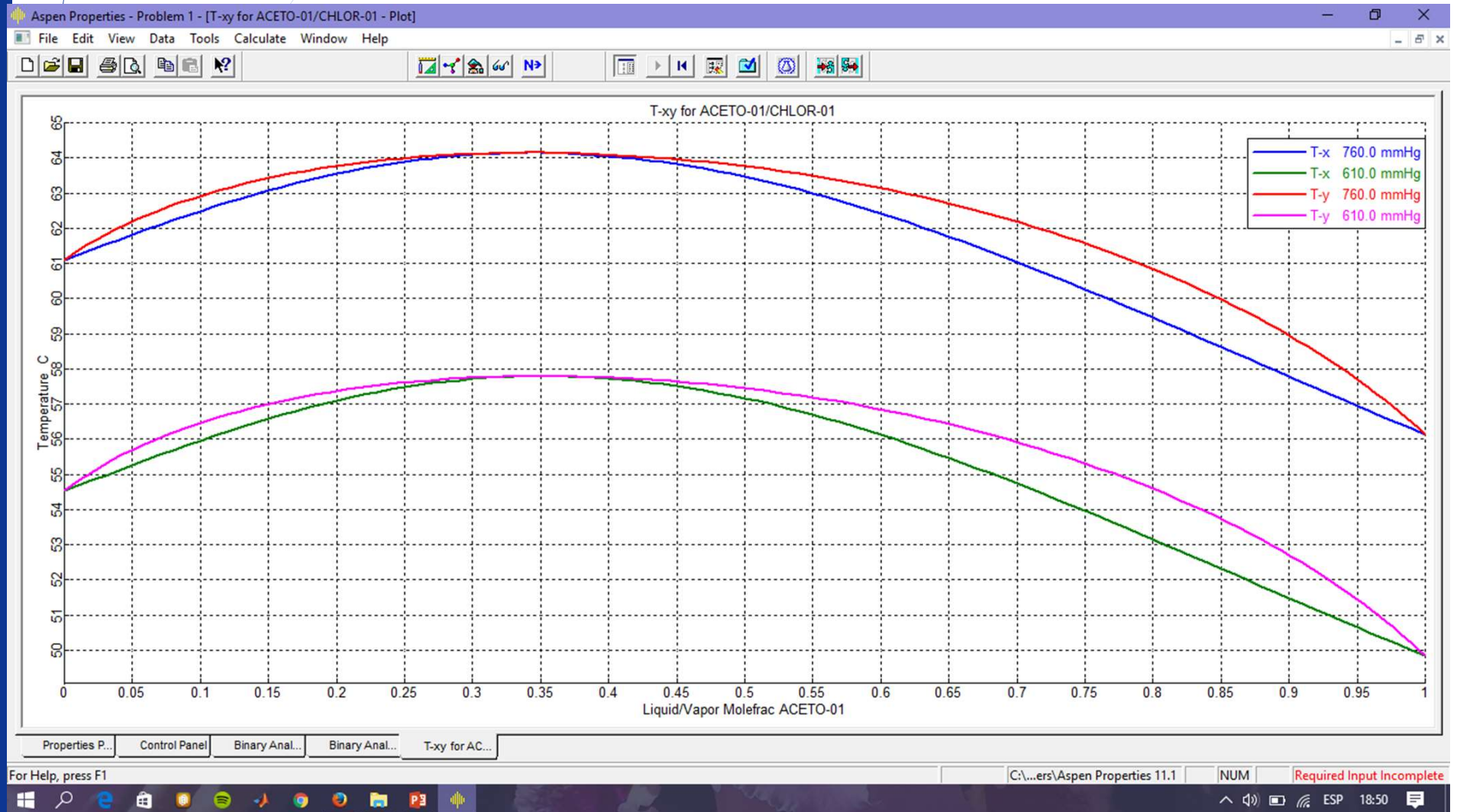
After running this analysis, you must re-run the problem before you will be able to export report files.

Aceptar Cancelar

En la ventana emergente hacemos click en Aceptar

Obtenemos el diagrama de fases ELV Temperatura vs. x,y a las presiones de 610mmHg y 760 mmHg

Ahora podemos estudiar el comportamiento del punto azeotrópico



Haciendo click en la pestaña inferior Binary Analysis obtenemos los resultados correspondientes a la Temperatura, Constantes de Equilibrio (K_1 y K_2), Coeficientes de Actividad, Composición en fracción molar en fases vapor y líquida

Aspen Properties - Problem 1 - [Binary Analysis Results]

File Edit View Data Tools Plot Calculate Window Help

Binary analysis results

PRES	MOLEFRAC ACETO-01	TOTAL TEMP	TOTAL KVL ACETO-01	TOTAL KVL CHLOR-01	LIQUID GAMMA ACETO-01	LIQUID GAMMA CHLOR-01	VAPOR MOLEFRAC ACETO-01	VAPOR MOLEFRAC CHLOR-01	LIQUID MOLEFRAC ACETO-01	LIQUID MOLEFRAC CHLOR-01
760	0	61.09831	0.5271368	0.9999787	0.4461696	1	0	1	0	1
760	0.01	61.24371	0.542244	1.004624	0.4567577	0.9998892	0.00542243	0.9945776	0.01	0.99
760	0.02	61.38802	0.5574315	1.00903	0.4673203	0.9995614	0.0111482	0.9888518	0.02	0.98
760	0.03	61.53157	0.572699	1.013213	0.4778532	0.9990234	0.01718	0.98282	0.03	0.97
760	0.04	61.67397	0.5880298	1.017163	0.4883496	0.998282	0.0235195	0.9764804	0.04	0.96
760	0.05	61.81486	0.6034071	1.020871	0.4988028	0.9973436	0.0301679	0.9698321	0.05	0.95
760	0.06	61.95389	0.6188139	1.024329	0.5092065	0.9962147	0.0371254	0.9628745	0.06	0.94
760	0.07	62.09072	0.634233	1.02753	0.5195547	0.9949015	0.0443919	0.955608	0.07	0.93
760	0.08	62.22504	0.6496473	1.030465	0.5298418	0.99341	0.0519664	0.9480335	0.08	0.92
760	0.09	62.35654	0.6650394	1.033129	0.5400623	0.9917461	0.0598472	0.9401528	0.09	0.91
760	0.1	62.48495	0.680392	1.035514	0.5502112	0.9899156	0.0680319	0.931968	0.1	0.9
760	0.11	62.60998	0.6956879	1.037615	0.5602836	0.9879239	0.0765175	0.9234825	0.11	0.89
760	0.12	62.73138	0.71091	1.039426	0.5702749	0.9857765	0.0853002	0.9146997	0.12	0.88
760	0.13	62.8489	0.7260413	1.040942	0.580181	0.9834784	0.0943757	0.9056243	0.13	0.87
760	0.14	62.96233	0.7410649	1.042159	0.5899978	0.9810347	0.1037388	0.8962612	0.14	0.86
760	0.15	63.07145	0.7559644	1.043073	0.5997216	0.9784502	0.1133839	0.8866161	0.15	0.85
760	0.16	63.17605	0.7707236	1.043681	0.6093491	0.9757296	0.1233046	0.8766954	0.16	0.84
760	0.17	63.27597	0.7853265	1.04398	0.618877	0.9728773	0.1334941	0.8665059	0.17	0.83
760	0.18	63.37103	0.7997577	1.043967	0.6283023	0.9698976	0.1439449	0.8560551	0.18	0.82
760	0.19	63.46108	0.8140021	1.043641	0.6376224	0.9667948	0.1546489	0.8453511	0.19	0.81

Plot Wizard Close

Properties P... Control Panel Binary Anal. **Binary Analy...** T-xy for AC...

For Help, press F1

Si no puedes ver las pestañas...

Required Input Incomplete

Si no puedes ver la pestaña revisa en el menú Window y activa la opción Workbook

Aspen Properties - Problem 1 - [Binary Analysis Results]

File Edit View Data Tools Plot Calculate Window Help

Binary analysis results

PRES	MOLEFRAC ACETO-01	TOTAL TEMP
mmHg		C
760	0	61,09831
760	0,01	61,24371
760	0,02	61,38802
760	0,03	61,53157
760	0,04	61,67397
760	0,05	61,81486
760	0,06	61,95389
760	0,07	62,09072
760	0,08	62,22504
760	0,09	62,35654
760	0,1	62,48495
760	0,11	62,60998
760	0,12	62,73138
760	0,13	62,8489
760	0,14	62,96233
760	0,15	63,07145
760	0,16	63,17605
760	0,17	63,27597
760	0,18	63,37103
760	0,19	63,46108

Window menu options:

- Cascade
- Tile
- Arrange Icons
- Normal
- Workbook**
- Wallpaper
- 1 Properties Parameters Binary Interaction WILSON-1 (T-DEPENDENT) - Data Browser
- 2 Control Panel
- 3 Binary Analysis
- ☒ 4 Binary Analysis Results
- 5 T-xy for ACETO-01/CHLOR-01 - Plot

Binary analysis results table (continued):

VAPOR MOLEFRAC CHLOR-01	LIQUID MOLEFRAC ACETO-01	LIQUID MOLEFRAC CHLOR-01
1	0	1
0,9945776	0,01	0,99
0,9888518	0,02	0,98
0,98282	0,03	0,97
0,9764804	0,04	0,96
0,9698321	0,05	0,95
0,9628745	0,06	0,94
0,955608	0,07	0,93
0,9480335	0,08	0,92
0,9401528	0,09	0,91
0,931968	0,1	0,9
0,9234825	0,11	0,89
0,9146997	0,12	0,88
0,9056243	0,13	0,87
0,8962612	0,14	0,86
0,8866161	0,15	0,85
0,8766954	0,16	0,84
0,8665059	0,17	0,83
0,8560551	0,18	0,82
0,8453511	0,19	0,81

Plot Wizard Close

Usamos la opción Plot Wizard para graficar Gamma vs. x

Properties P... Control Panel Binary Anal... Binary Anal... T-xy for AC...

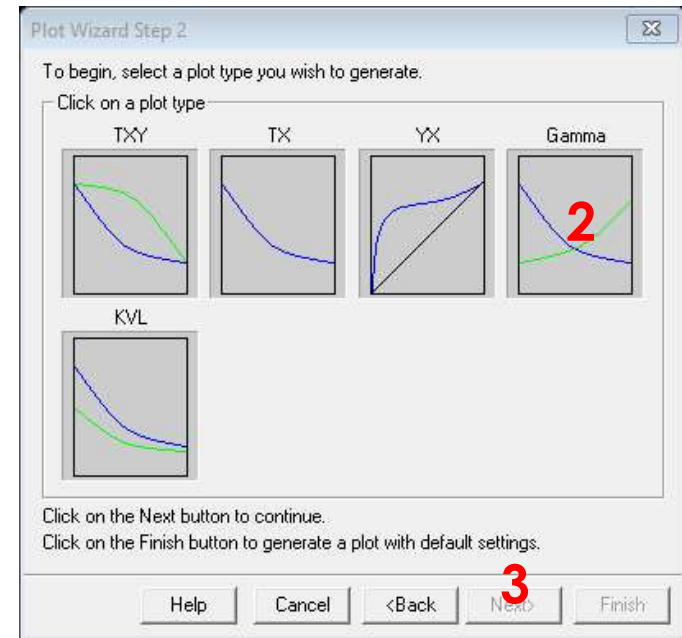
Displays the windows as worksheets in a workbook

C:\...ers\Aspen Properties 11.1 NUM Required Input Incomplete

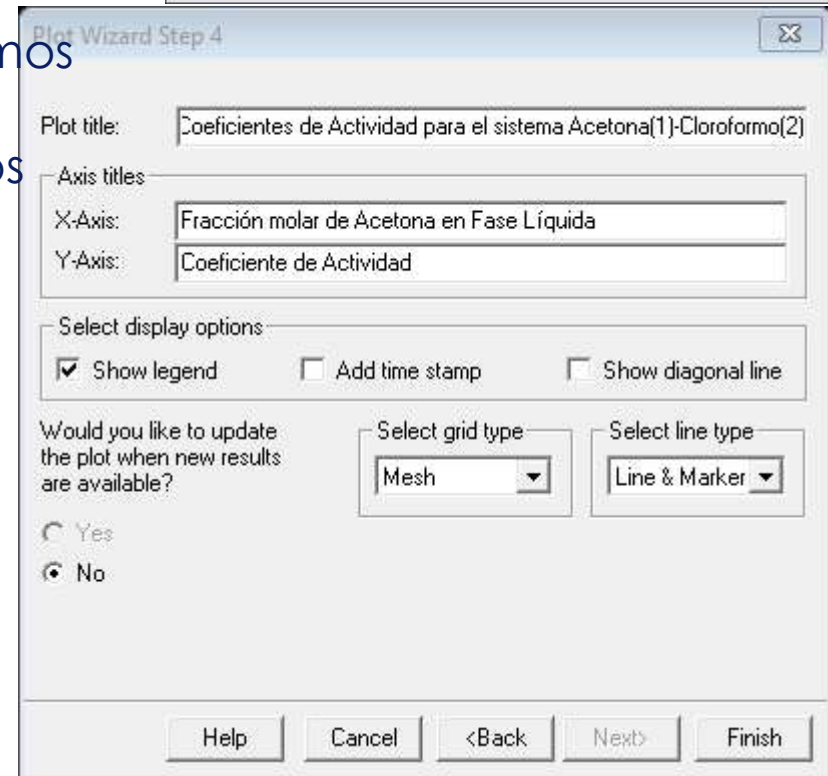
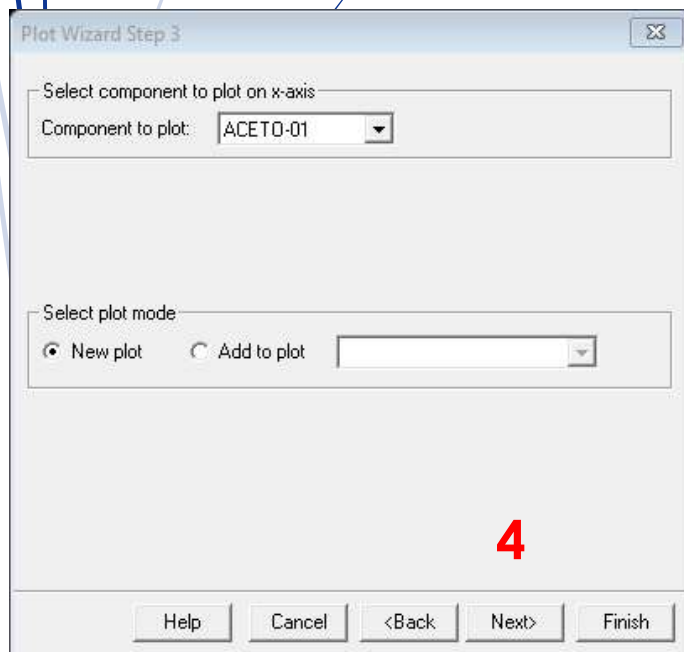
18:54



Hacemos click en las ventanas emergentes en el orden indicado



Aquí → personalizamos el diagrama con los títulos de los ejes



Obtenemos la relación entre los coeficientes de actividad y la fracción molar de la fase líquida

Ahora debes analizar el efecto de la presión sobre la no idealidad de la fase líquida

