

## Caso 1 A

### OBJETIVO:

El objetivo de este caso es estudiar los modelos termodinámicos que mejor se ajustan al sistema isobutano-n-butano.

### PROCEDIMIENTO:

Para poder ver la bondad de los distintos modelos termodinámicos, se disponen de los datos bibliográficos de sistema.

### Sistema isobutano – n-butano Datos de equilibrio

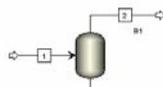
x (i-C4)	P (bar)	y (i-C4)	P (bar)
0,00	15,54	0,00	15,54
0,10	15,99	0,10	15,93
0,20	16,45	0,20	16,33
0,30	16,91	0,30	16,75
0,40	17,37	0,40	17,19
0,50	17,84	0,50	17,65
0,60	18,30	0,60	18,12
0,70	18,77	0,70	18,61
0,80	19,24	0,80	19,12
0,90	19,72	0,90	19,65
1,00	20,20	1,00	20,20

En primer lugar vamos a utilizar como base de cálculo la *ecuación de estado Peng-Robinson*.

Para obtener los datos de equilibrio se pueden utilizar dos procedimientos:

#### Procedimiento 1

Lo primero es colocar tres corrientes materiales (Material Stream) y un separador Flash (Separador Flash2).



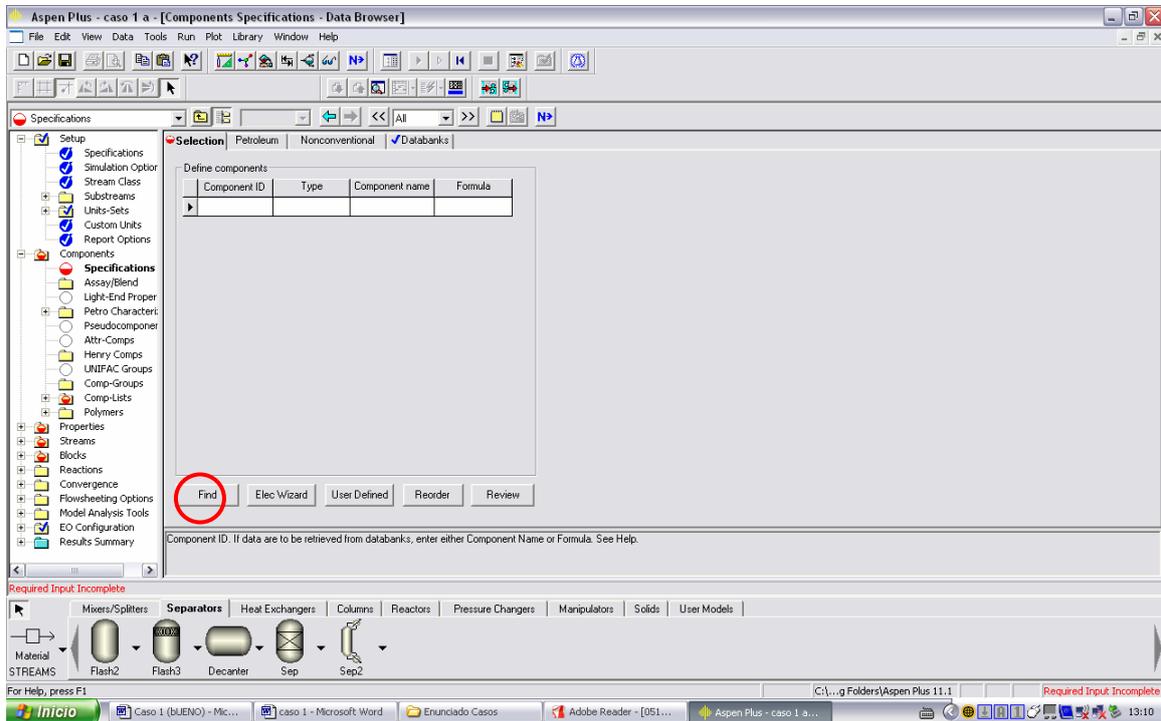
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

- - -

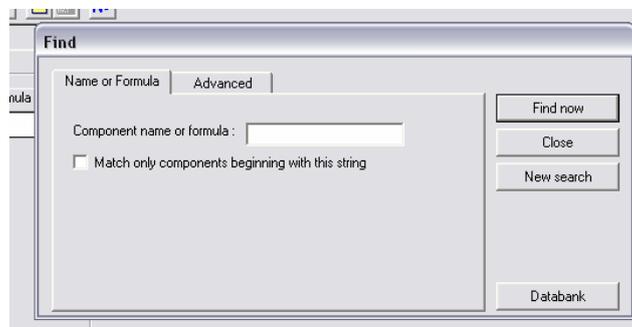
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

Posteriormente damos a  Next y le ponemos título al caso. Luego seleccionamos los componentes en la siguiente pantalla:



Pulsando el botón Find, podemos buscar los distintos componentes, con su nombre o fórmula en la pantalla:



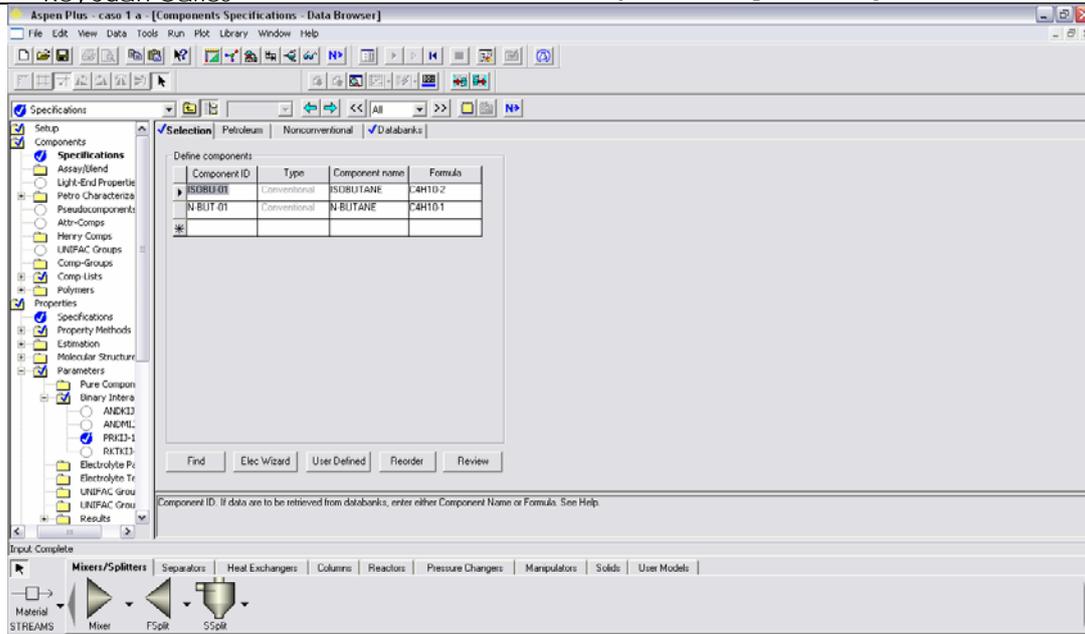
De esta forma añadimos el isobutano y el n-butano a la lista de componentes.



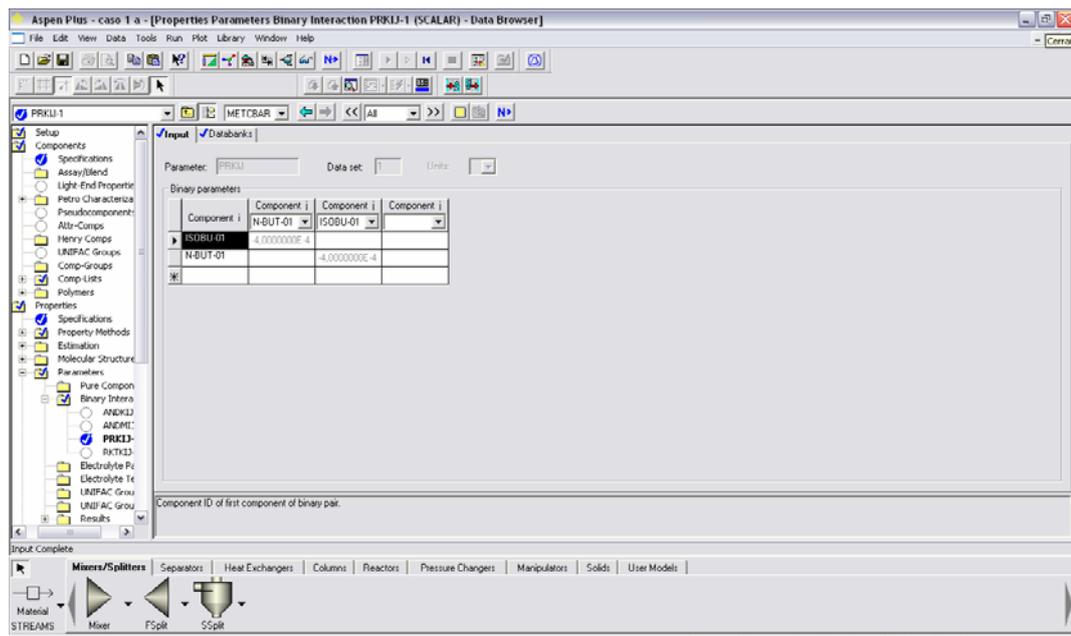
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70



Una vez que tenemos seleccionados los componentes, dando a Next, nos aparece la pantalla en la que nos indica los parámetros binarios de interacción.



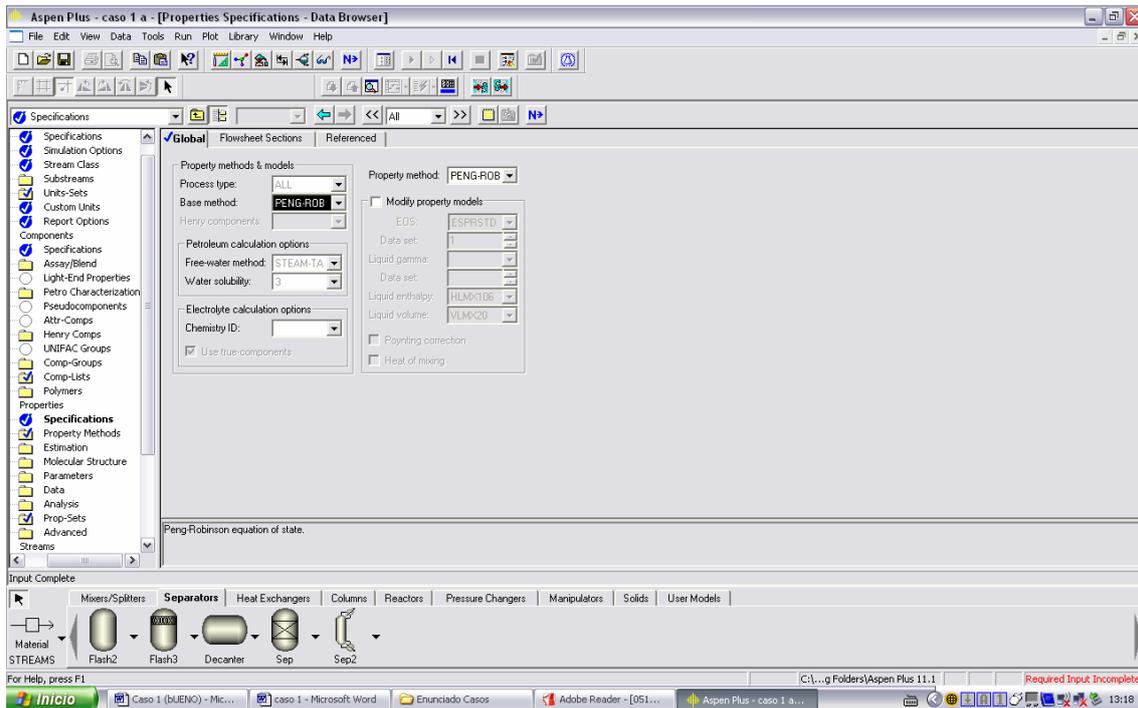
Una vez que tenemos seleccionados los componentes, dando a Next, nos aparece la pantalla que permite seleccionar la base de cálculo, que en este caso será Peng-

**CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70**

---

**ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70**

Cartagena99



Volviendo a pulsar Next, el Aspen Plus, nos muestra la pantalla:



La respuesta a este mensaje será OK, a no ser que dispongamos de alguna información sobre determinadas propiedades de los componentes, que queramos introducir.

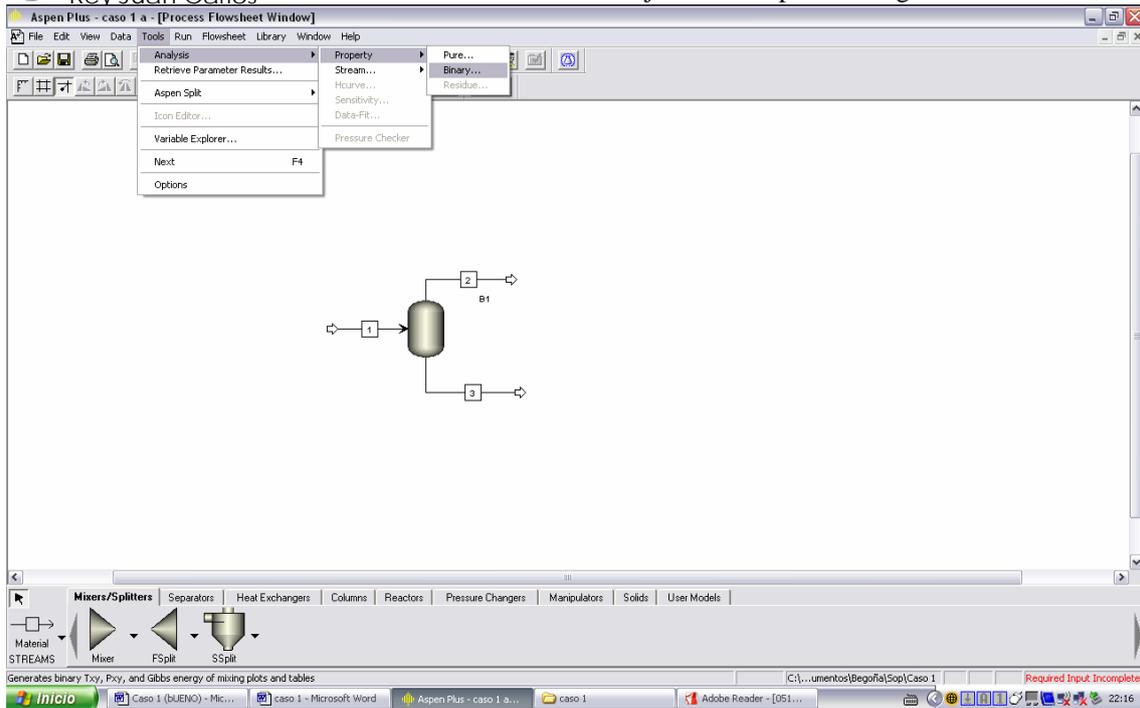
Indicada la base de cálculo y los componentes, ya podemos hacer uso de la herramienta TOOLS → Análisis → Property → Binary.

**CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70**

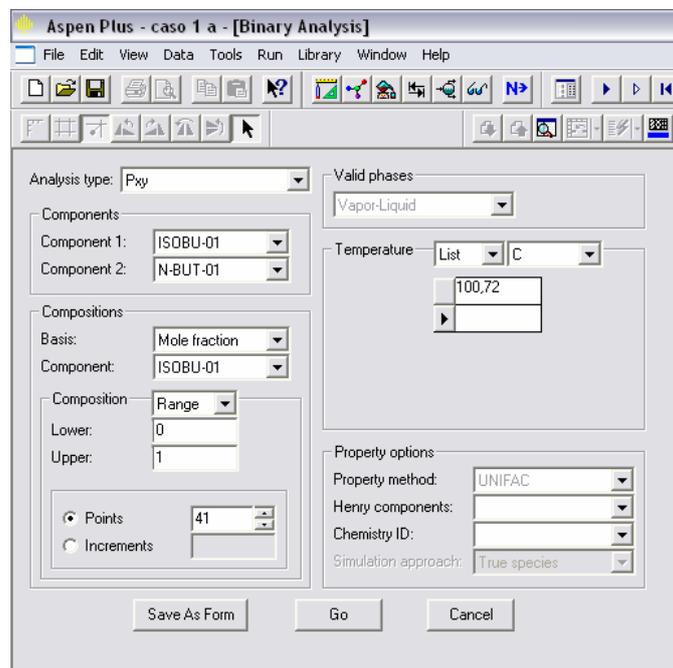
---

**ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70**





En este momento indicamos el tipo de gráfico a realizar (en este caso P-xy) ya que los datos bibliográficos de partida son datos de presión en función de la composición. La temperatura de trabajo es de 100,72°C.

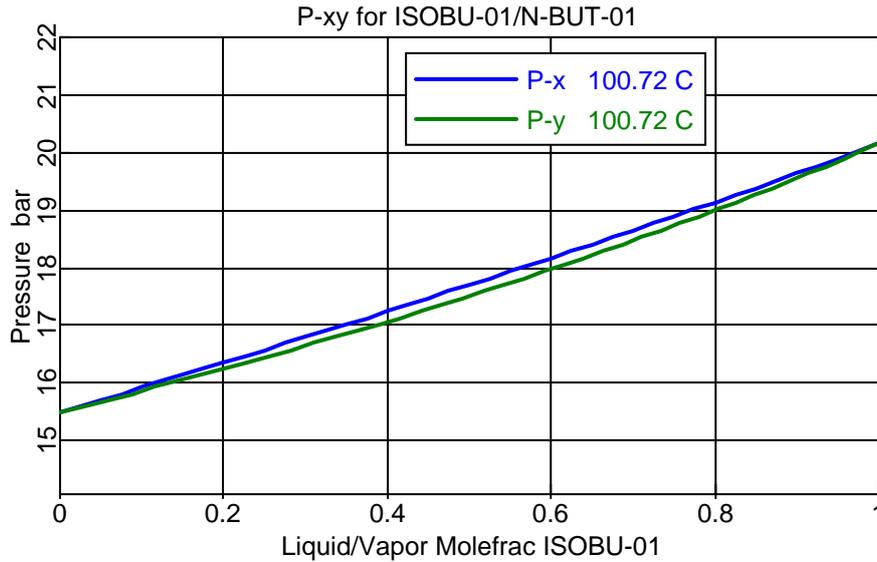


**CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70**

---

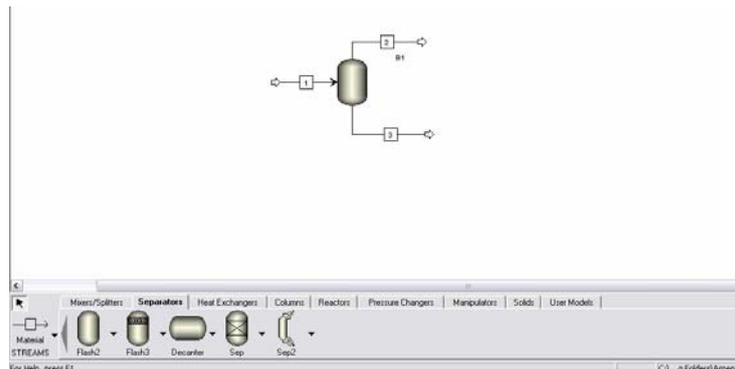
**ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70**





### Procedimiento 2

Lo primero es colocar tres corrientes materiales (Material Stream) y un separador Flash (Separador Flash2).



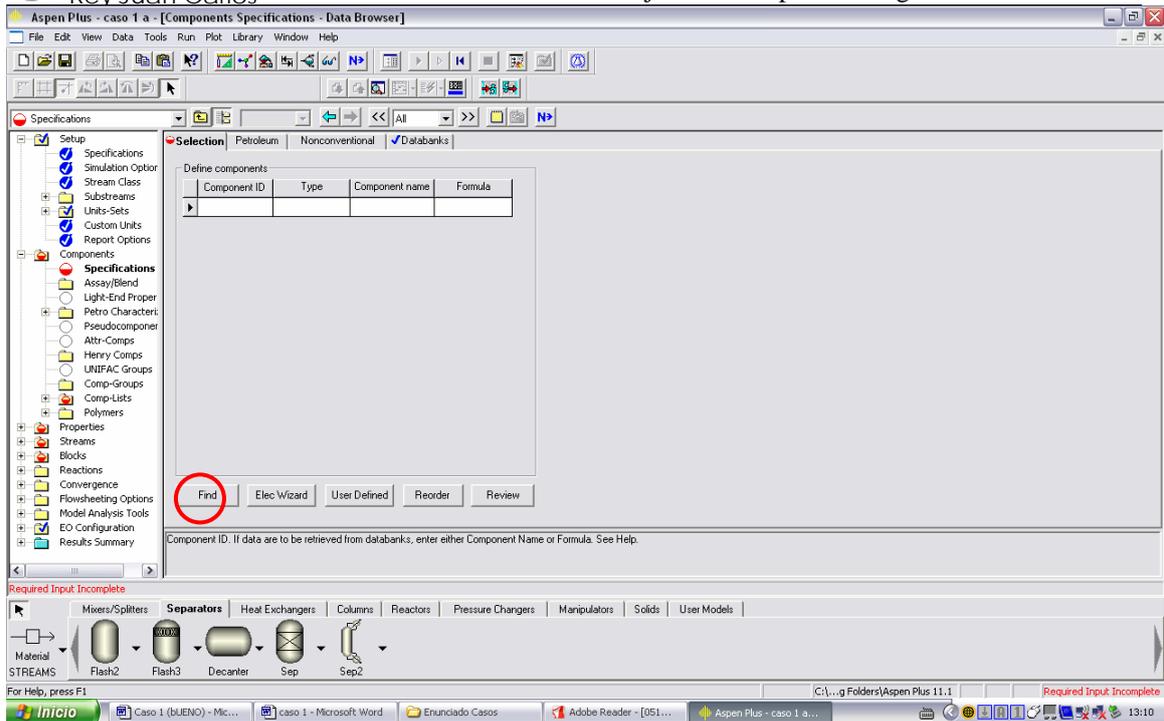
Posteriormente damos a  Next y le ponemos título al caso. Luego seleccionamos los componentes en la siguiente pantalla:

**CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70**

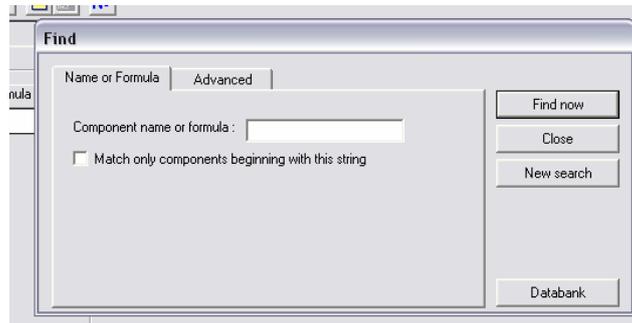
---

**ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70**

**Cartagena99**



Pulsando el botón Find, podemos buscar los distintos componentes, con su nombre o fórmula en la pantalla:



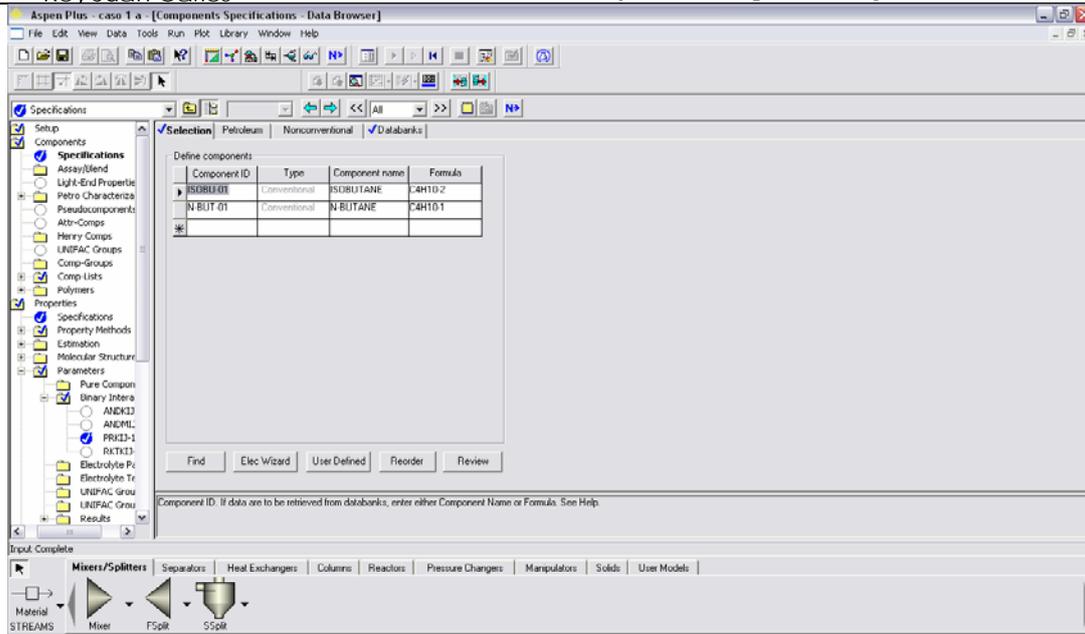
De esta forma añadimos el isobutano y el n-butano a la lista de componentes.

Cartagena99

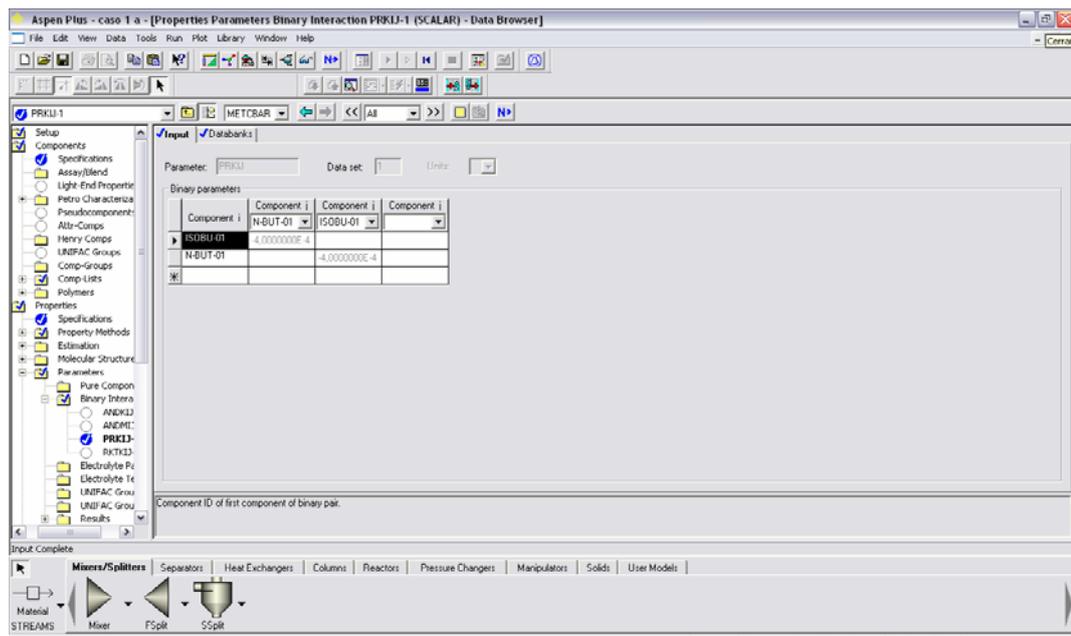
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70



Una vez que tenemos seleccionados los componentes, dando a Next, nos aparece la pantalla en la que nos indica los parámetros binarios de interacción.



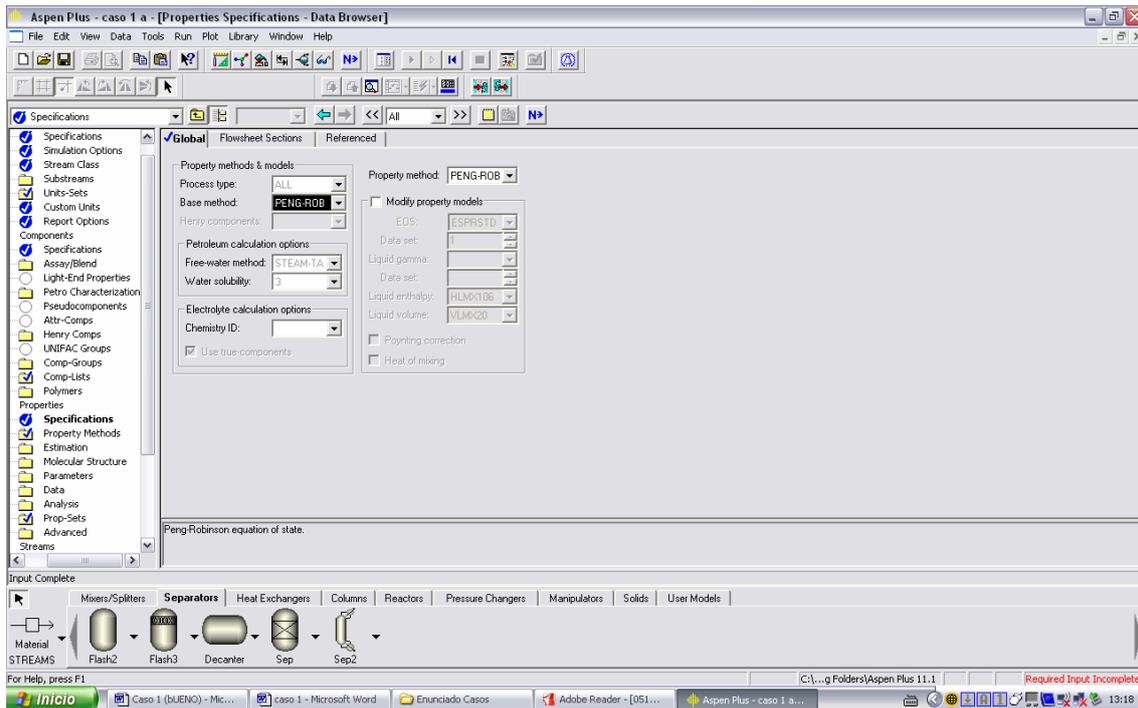
Posteriormente nos aparece la pantalla que permite seleccionar la base de cálculo, que en este caso será Peng-Robinson.

Cartagena99

**CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE**  
**LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70**

---

**ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS**  
**CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70**



Volviendo a pulsar Next, el Aspen Plus, nos muestra la pantalla:



La respuesta a este mensaje será OK, a no ser que dispongamos de alguna información sobre determinadas propiedades de los componentes, que queramos introducir.

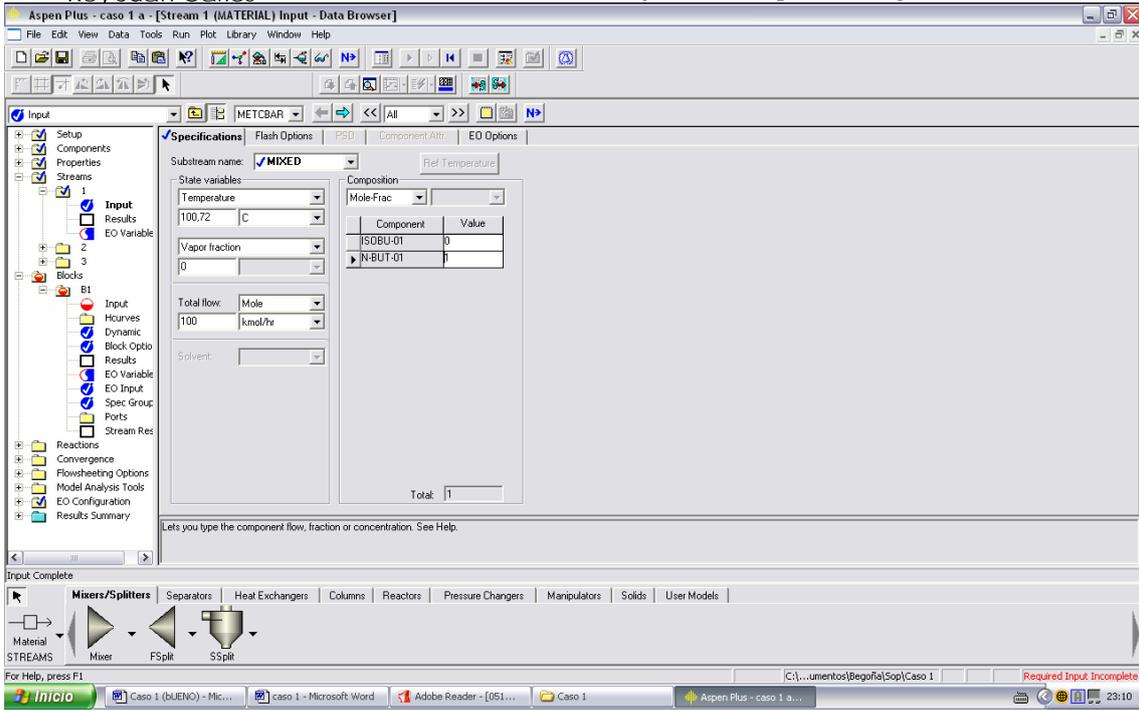
Posteriormente se indican las condiciones de la corriente de entrada. En primer lugar indicamos la temperatura, suponemos una temperatura de 100,72 °C. Posteriormente indicamos la fracción de vapor, que pondremos 0, ya que con este valor

**CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70**

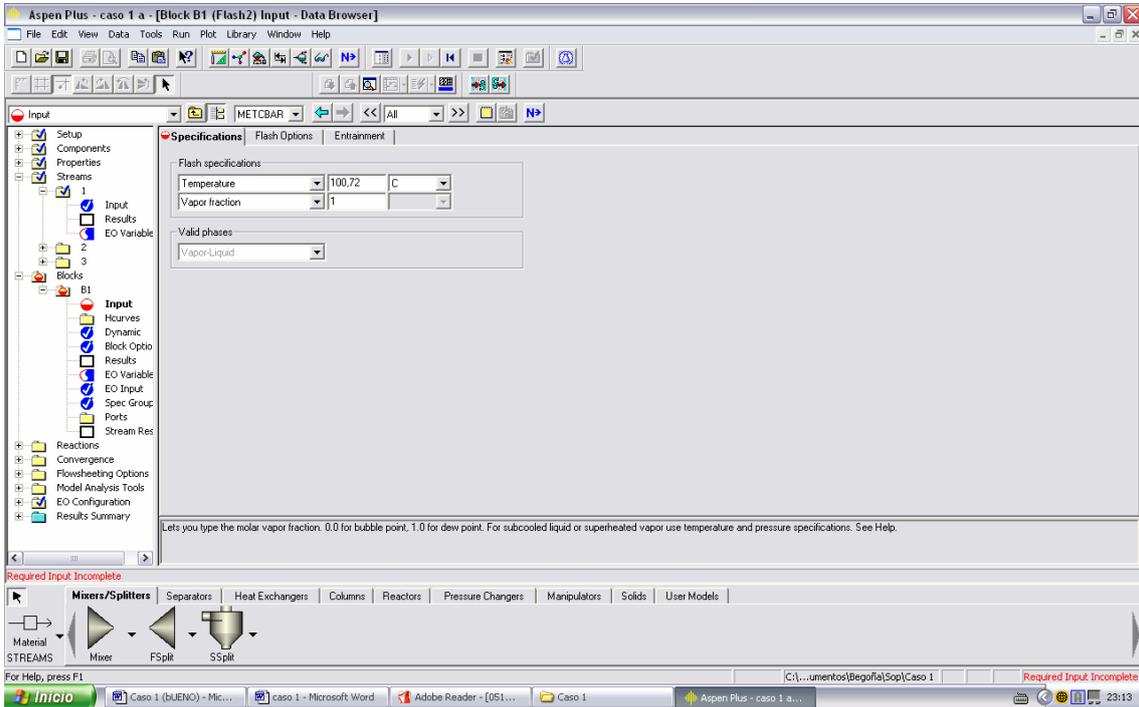
---

**ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70**





Posteriormente se indican las condiciones existentes en el flash. Se indica una temperatura de 100,72°C y una fracción de vapor 1.

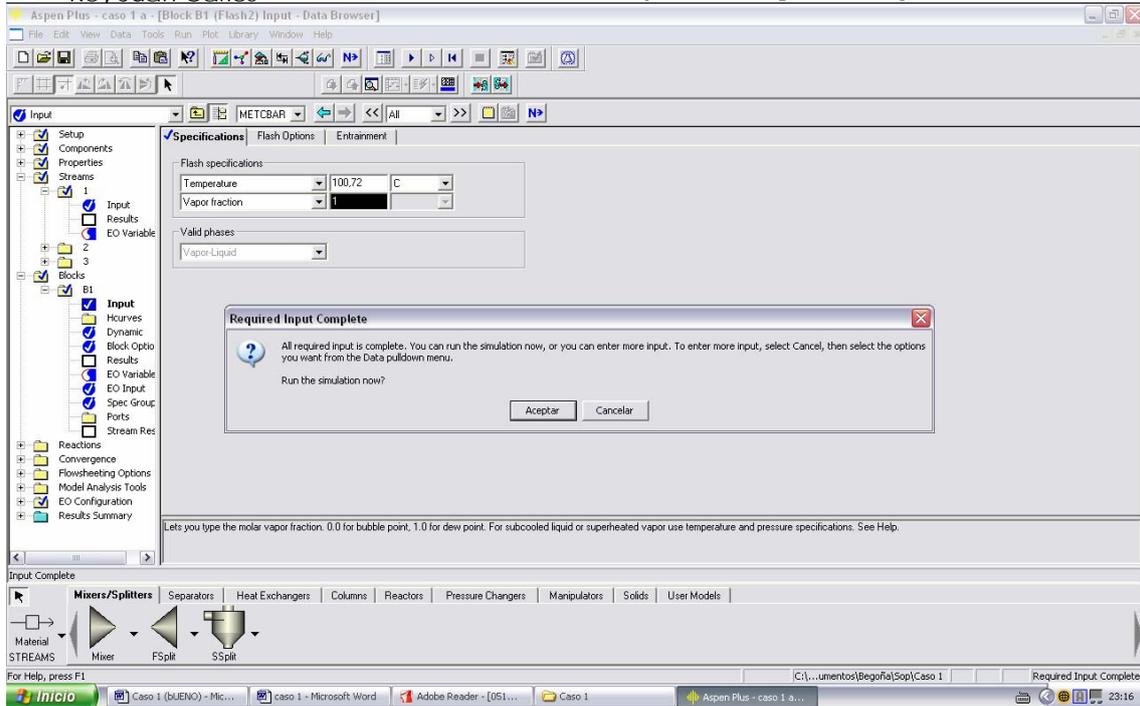


Cartagena99

**CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE**  
**LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70**

---

**ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS**  
**CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70**



Los resultados obtenidos son:

Fracción molar i-butano	Presión de burbuja (bar)	Presión de rocío (bar)
0	15,55	15,55
0,1	15,99	15,93
0,2	16,44	16,33
0,3	16,89	16,74
0,4	17,35	17,17
0,5	17,81	17,62
0,6	18,28	18,10
0,7	18,74	18,59
0,8	19,21	19,10
0,9	19,70	19,63
1	20,19	20,19

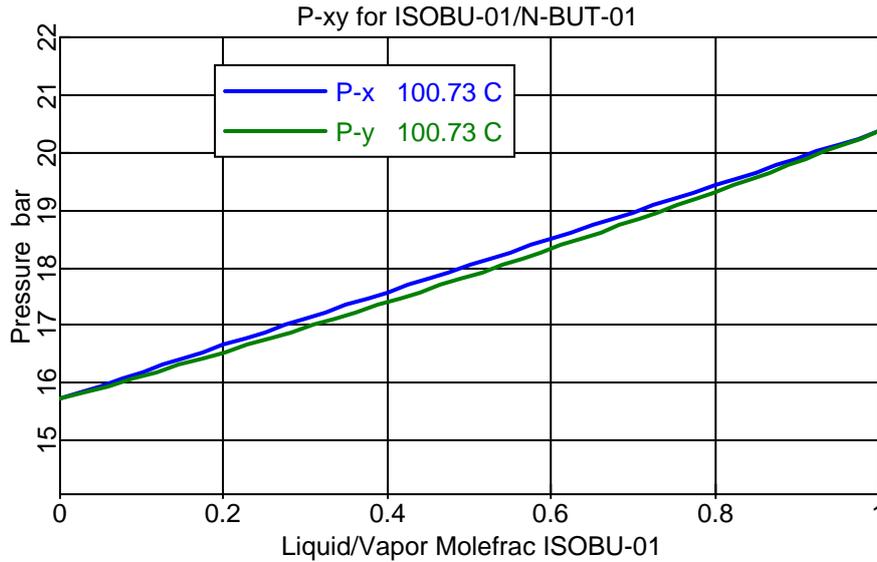
Posteriormente repetimos el procedimiento con otra base de cálculo la *ecuación de estado RK-SOAVE*. En este caso utilizaremos el procedimiento de cálculo 2. La representación gráfica obtenida es la siguiente:



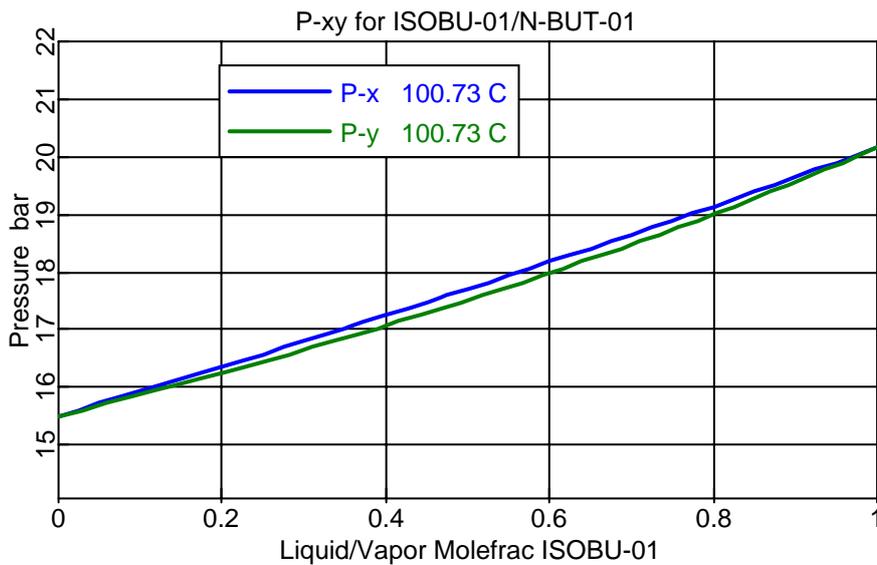
**CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE**  
**LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70**

---

**ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS**  
**CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70**



Posteriormente repetimos el procedimiento con otra base de cálculo un *modelo de coeficiente de Actividad: UNIFAC*. En este caso los datos de equilibrio obtenidos son:



### CONCLUSIONES:

La ecuación de estado que más ajusta los datos obtenidos en simulación, con los

**CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE**  
**LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70**

---

**ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS**  
**CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70**

Cartagena99

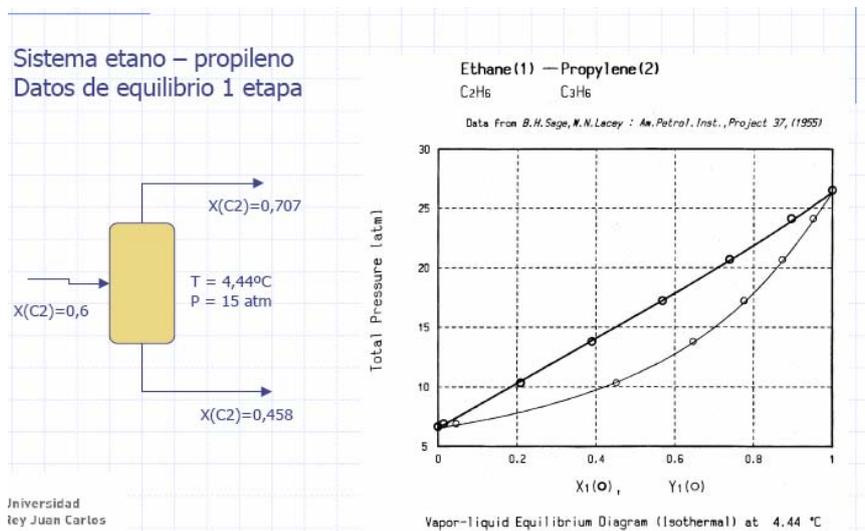
## Caso 1 B

### OBJETIVO:

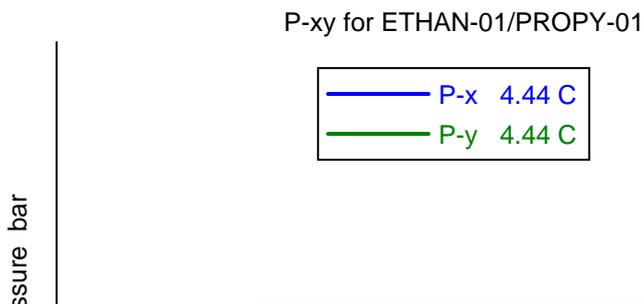
El objetivo de este caso es estudiar los modelos termodinámicos que mejor se ajustan al equilibrio de la mezcla etano-propileno.

### PROCEDIMIENTO:

Para poder ver la bondad de los distintos modelos termodinámicos, se disponen de la gráfica de equilibrio, que se muestra en la figura, y del dato de la separación obtenida en un Flash, para una temperatura de 4,44°C y una presión de 15 atm.



En primer lugar se ha realizado la simulación con el modelo de actividad *Unifac*. La gráfica de equilibrio se muestra a continuación:



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

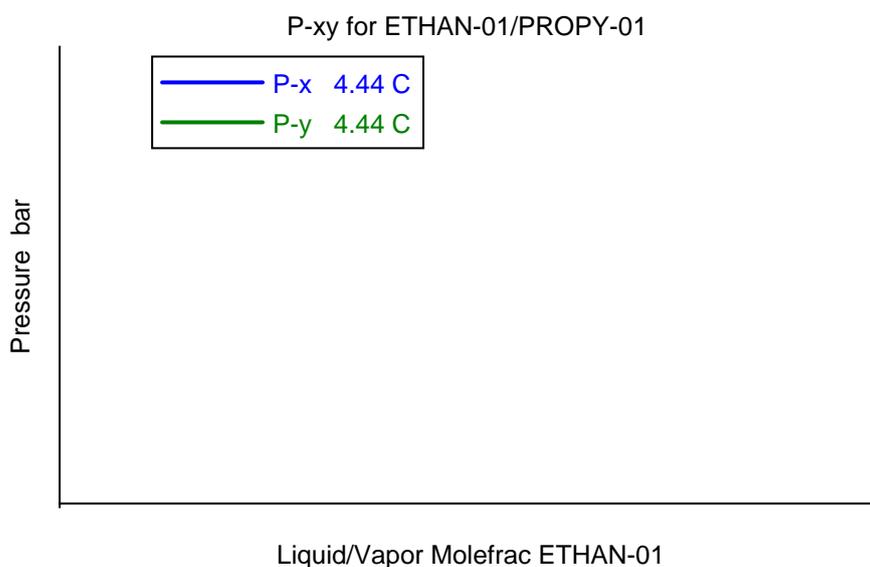
Cartagena99

Si consideramos la separación de la corriente líquida y vapor a 4,44°C y presión de 15 atmósferas, las composiciones de las corrientes obtenidas serán:

Fracción molar etano, corriente vapor: 0,710  
Fracción molar etano, corriente líquida: 0,447.

Como observamos, la desviación, con respecto a los datos teórico, es de 0,03 para el vapor y 0,11 para el líquido.

En segundo lugar se ha realizado la simulación con el modelo de actividad **Peng Robinson**. La gráfica de equilibrio se muestra a continuación:



Si consideramos la separación de la corriente líquida y vapor a 4,44°C y presión de 15 atmósferas, las composiciones de las corrientes obtenidas serán:

Fracción molar etano, corriente vapor: 0,703  
Fracción molar etano, corriente líquida: 0,445.

Como observamos, la desviación, con respecto a los datos teórico, es de 0,04 para el vapor y 0,13 para el líquido.

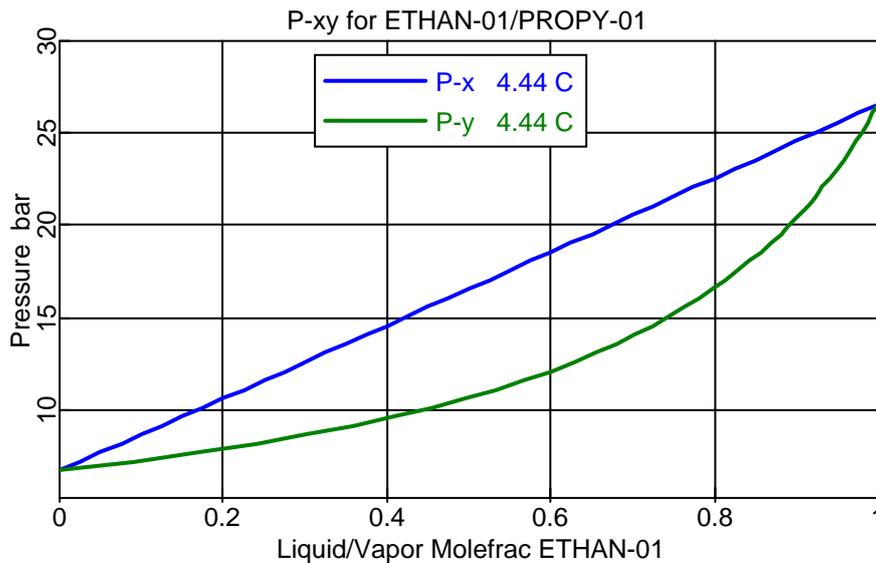
En tercer lugar se ha realizado la simulación con el modelo de actividad **Uniquac**. La gráfica de equilibrio se muestra a continuación:

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99



Si consideramos la separación de la corriente líquida y vapor a 4,44°C y presión de 15 atmósferas, las composiciones de las corrientes obtenidas serán:

Fracción molar etano, corriente vapor: 0,737  
Fracción molar etano, corriente líquida: 0,415.

Como observamos, la desviación, con respecto a los datos teórico, es de 0,30 para el vapor y 0,43 para el líquido.

## CONCLUSIONES

La base de cálculo que mejor ajusta los datos experimentales a los teóricos es el modelo de actividad Unifac, ya que es el que obtiene menos desviación en la predicción del equilibrio.

## Caso 1 C

### OBJETIVO:

El objetivo de este caso es estudiar los modelos termodinámicos que mejor se ajustan al equilibrio de la mezcla etano-butano.

### PROCEDIMIENTO:

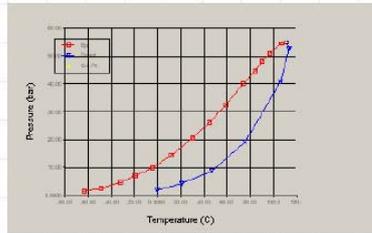
**CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70**

---

**ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70**



Sistema etano – butano  
 Envoltorio fases

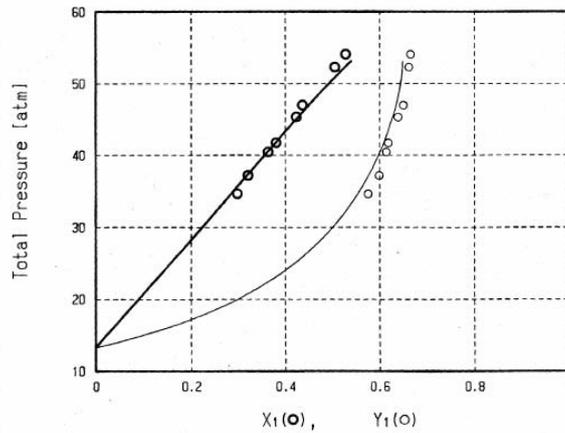


P (bar)	T (°C)
2,03	0,08
4,29	21,59
9,08	46,75
19,23	75,82
40,70	106,60
52,73	113,80
54,96	111,40

Universidad  
 Rey Juan Carlos

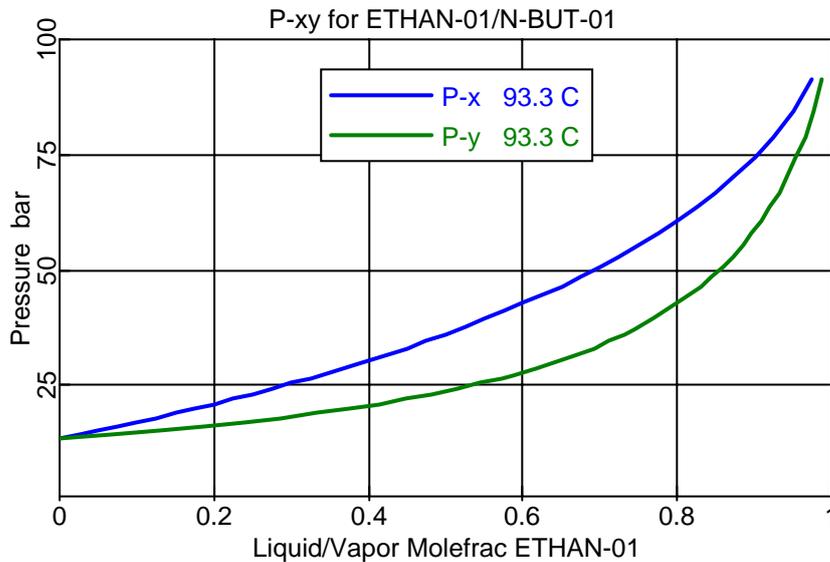
Ethane(1) — Butane (2)  
 C<sub>2</sub>H<sub>6</sub> C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>

Data From Mehra, V.S., Thodos, G. : J.Chem.Eng.Data. vol. 10, p. 307(1965)



Vapor-liquid Equilibrium Diagram (Isothermal) at 93.3 °C

En primer lugar se ha realizado la simulación con el modelo de actividad *Unifac*. La gráfica de equilibrio se muestra a continuación:



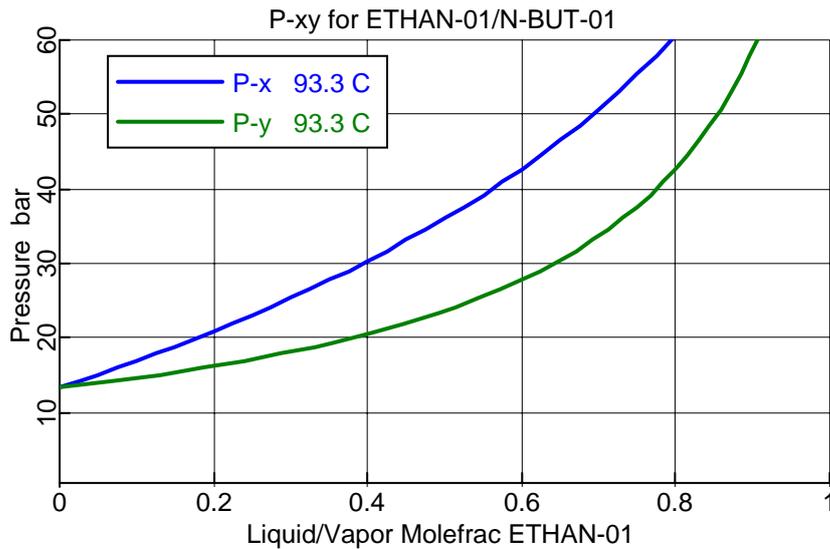
Como podemos apreciar, la gráfica presenta una forma distinta a la esperada, ya

**CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE**  
**LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70**

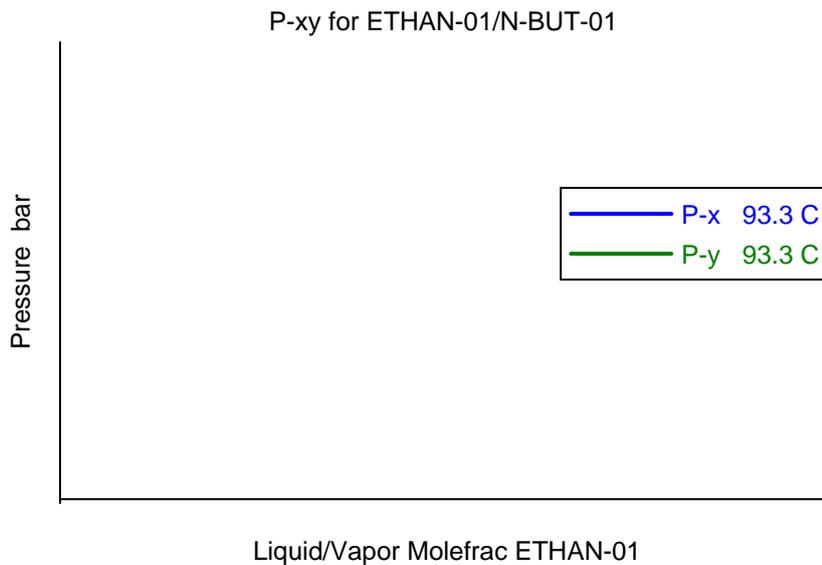
---

**ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS**  
**CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70**

Cartagena99



En segundo lugar se ha realizado la simulación con la ecuación de estado **Peng-Robinson**. La gráfica de equilibrio se muestra a continuación:



Como podemos observar, esta gráfica es mucho más parecida a la teórica.

CONCLUSIONES



**CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE**  
**LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70**

---

**ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS**  
**CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70**