

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

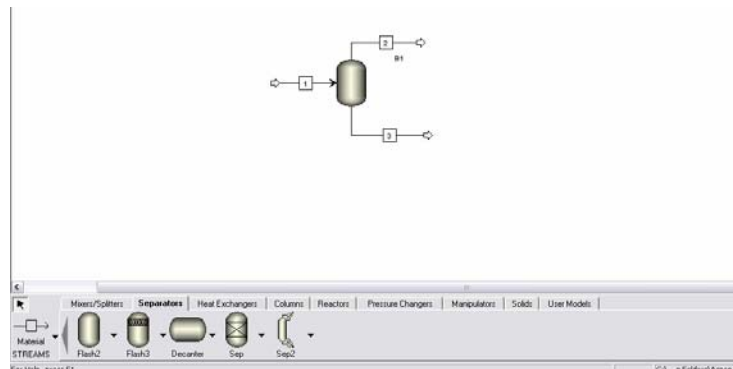
x (i-C4)	P (bar)	y (i-C4)	P (bar)
0,00	15,54	0,00	15,54
0,10	15,99	0,10	15,93
0,20	16,45	0,20	16,33
0,30	16,91	0,30	16,75
0,40	17,37	0,40	17,19
0,50	17,84	0,50	17,65
0,60	18,30	0,60	18,12
0,70	18,77	0,70	18,61
0,80	19,24	0,80	19,12
0,90	19,72	0,90	19,65
1,00	20,20	1,00	20,20


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

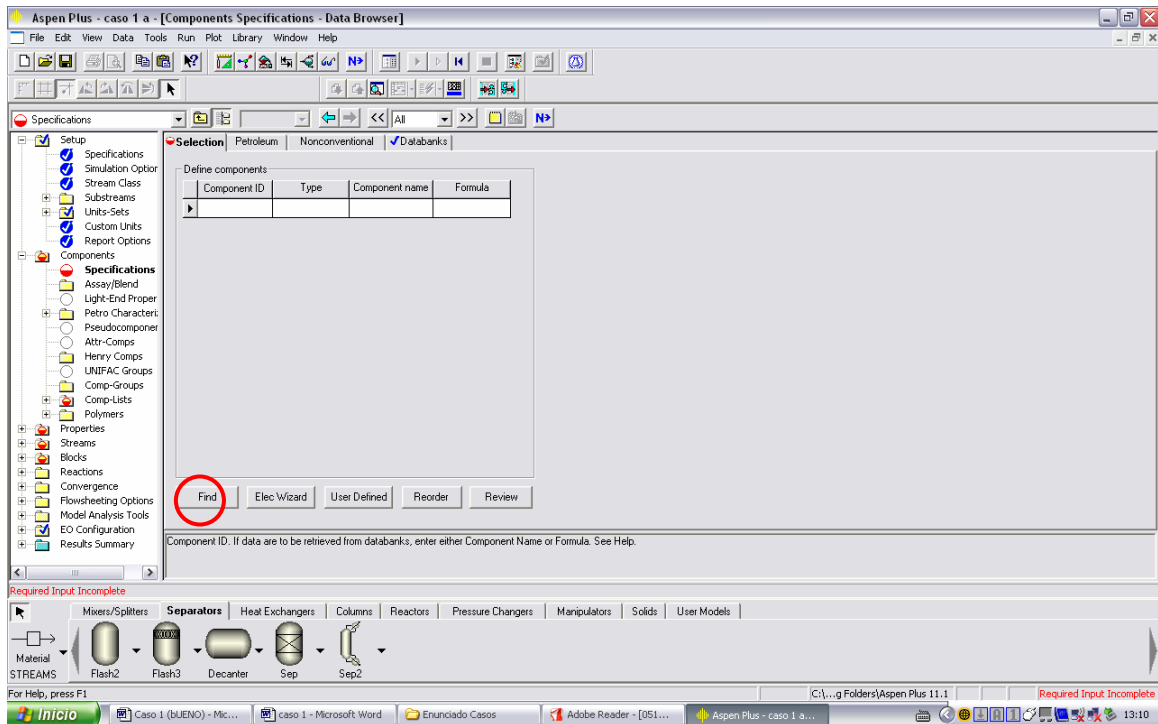
Para obtener los datos de equilibrio se pueden utilizar dos procedimientos:

Procedimiento 1

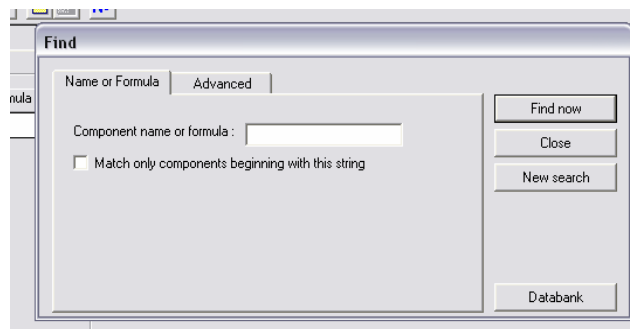
Lo primero es colocar tres corrientes materiales (Material Stream) y un separador Flash (Separador Flash2).



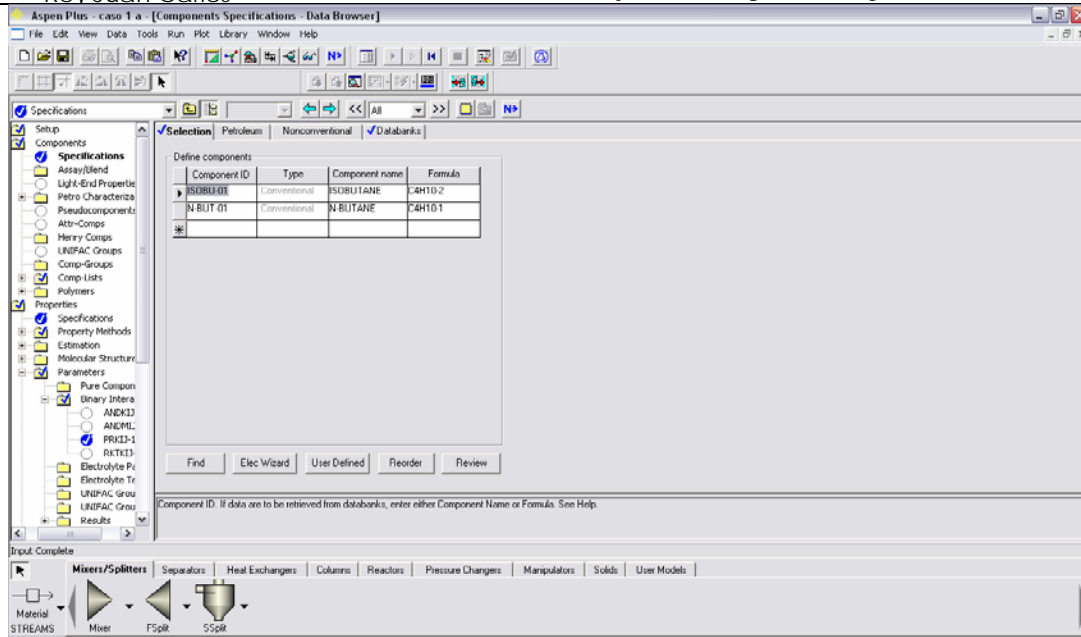
Posteriormente damos a  Next y le ponemos título al caso. Luego seleccionamos los componentes en la siguiente pantalla:



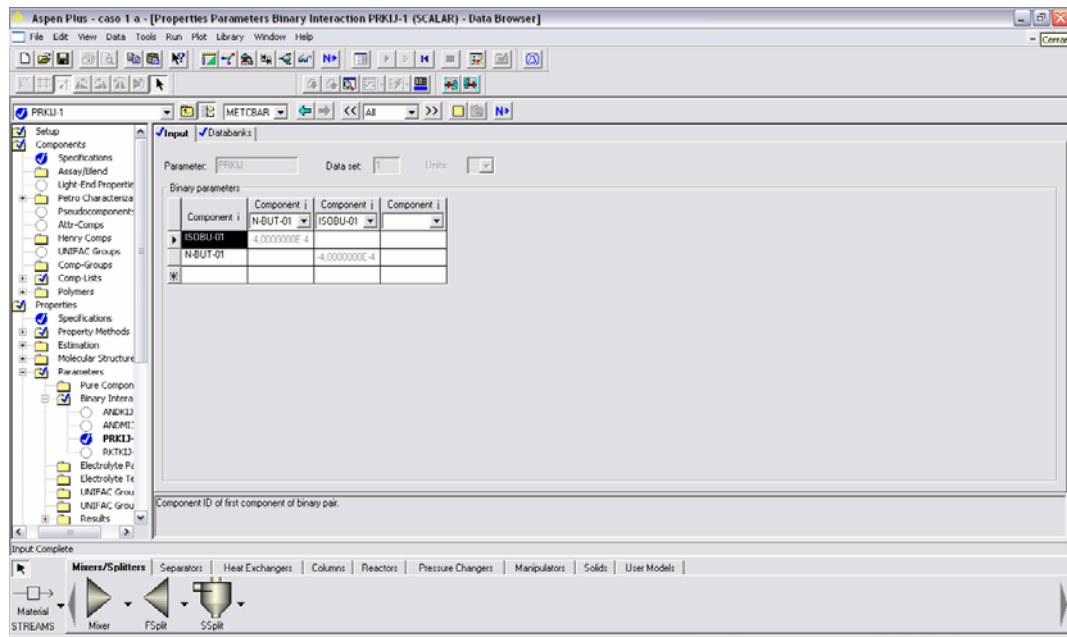
Pulsando el botón Find, podemos buscar los distintos componentes, con su nombre o fórmula en la pantalla:



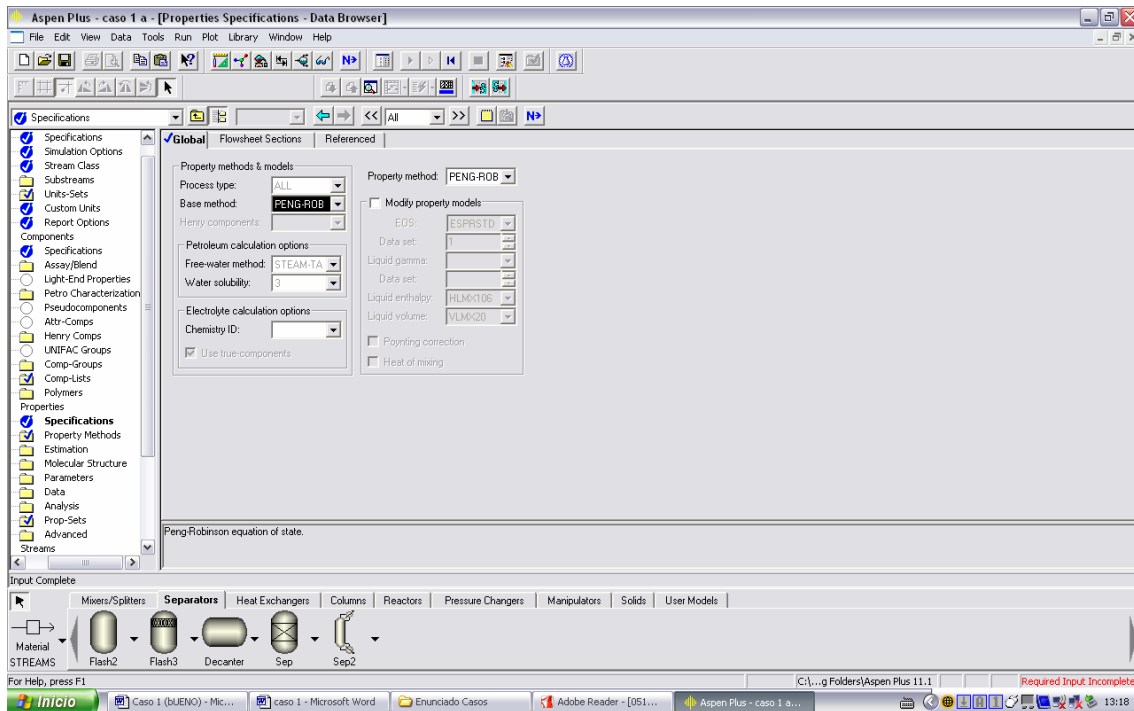
De esta forma añadimos el isobutano y el n-butano a la lista de componentes.



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-Robinson.

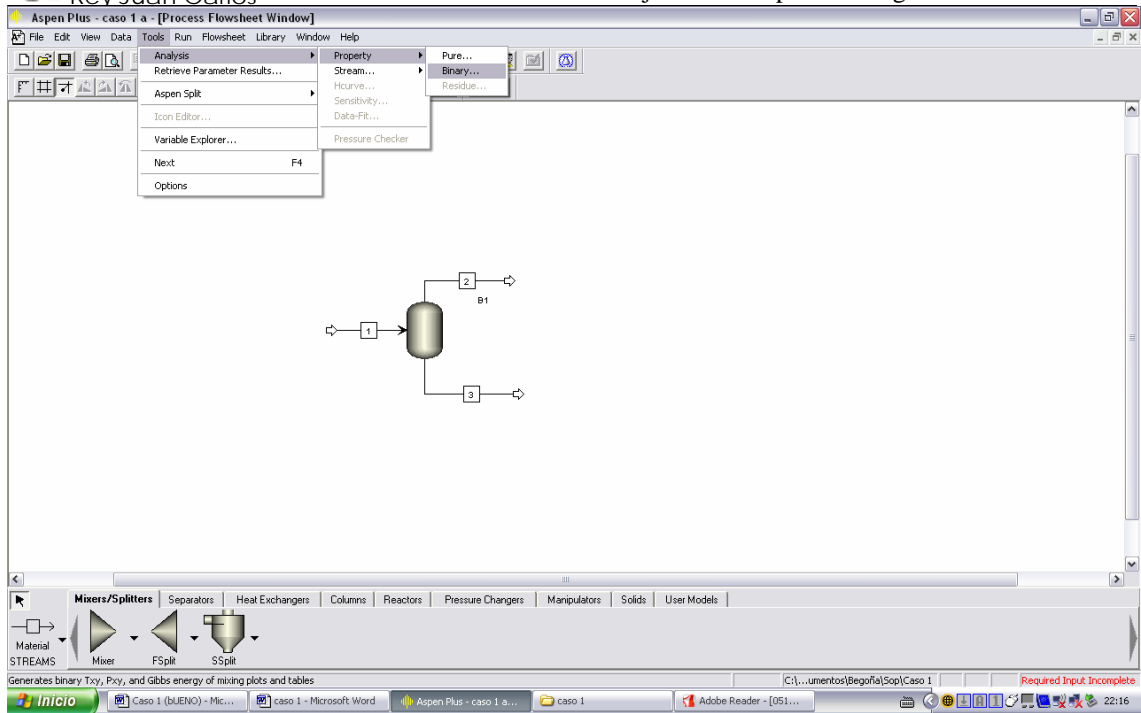


Volviendo a pulsar Next, el Aspen Plus, nos muestra la pantalla:

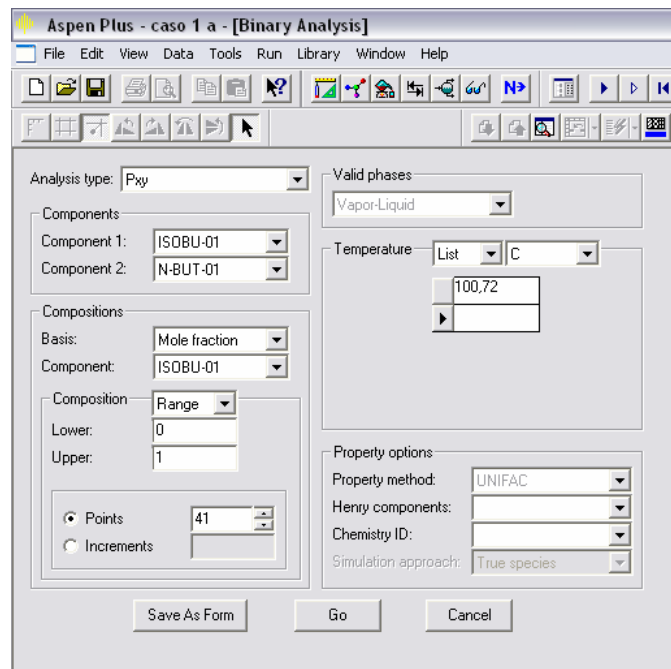


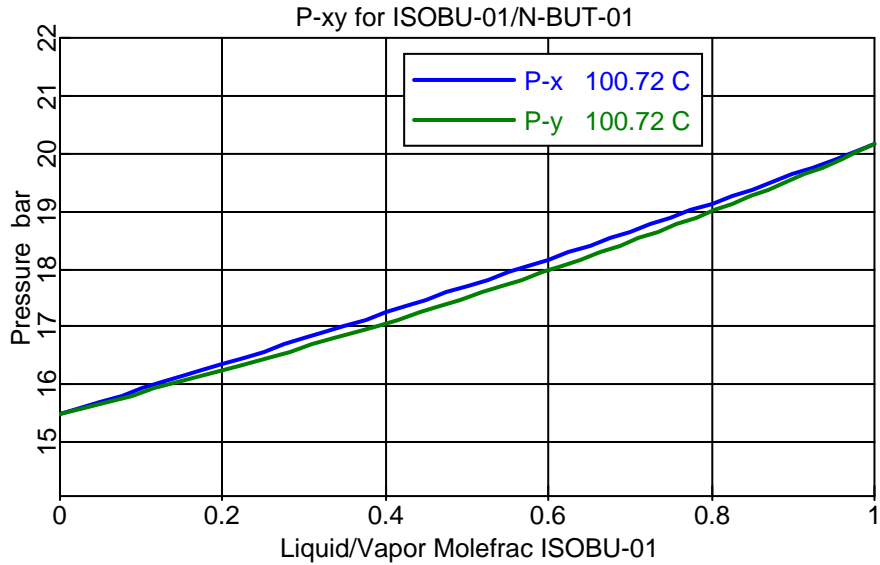
La respuesta a este mensaje será OK, a no ser que dispongamos de alguna información sobre determinadas propiedades de los componentes, que queramos introducir.

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



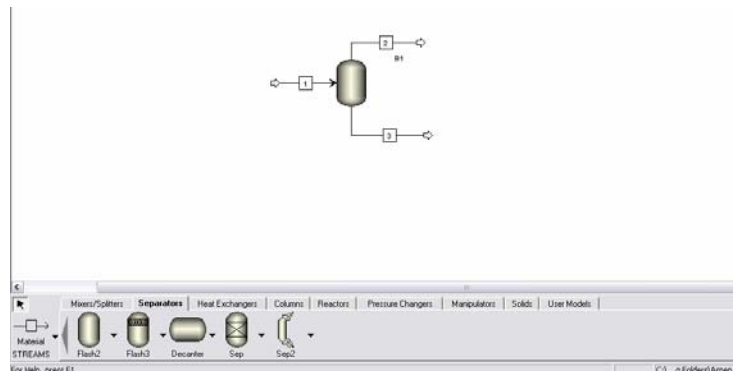
En este momento indicamos el tipo de gráfico a realizar (en este caso P-xy) ya que los datos bibliográficos de partida son datos de presión en función de la composición. La temperatura de trabajo es de 100,72°C.




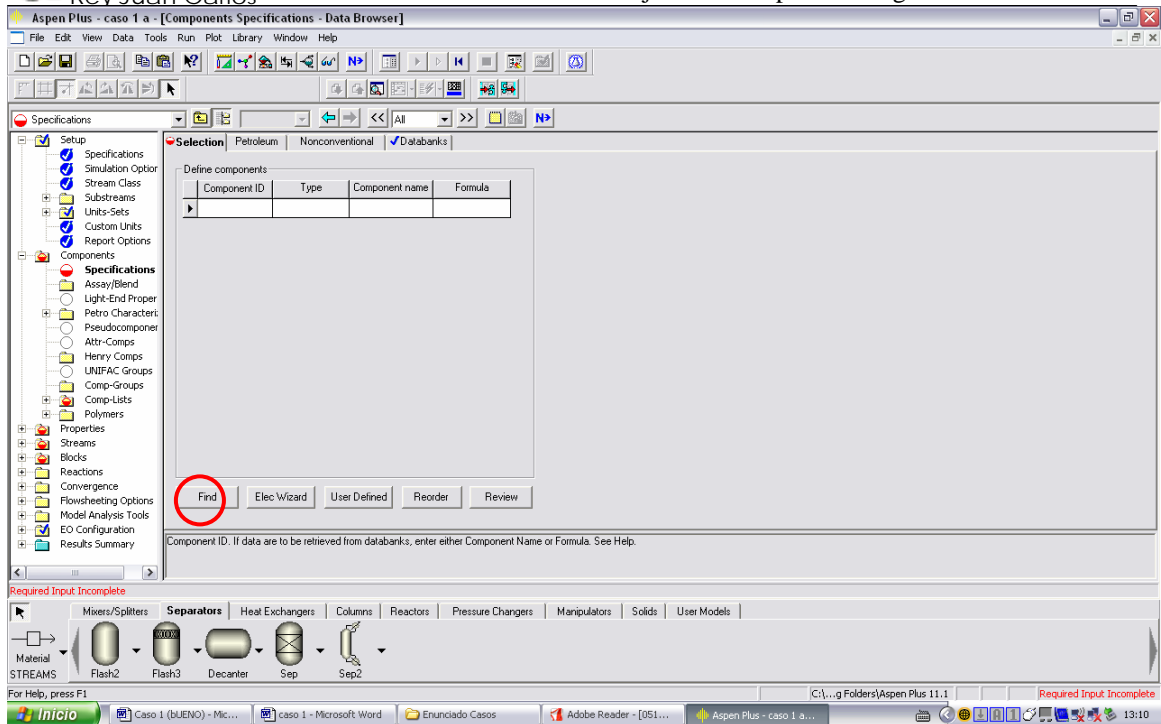


Procedimiento 2

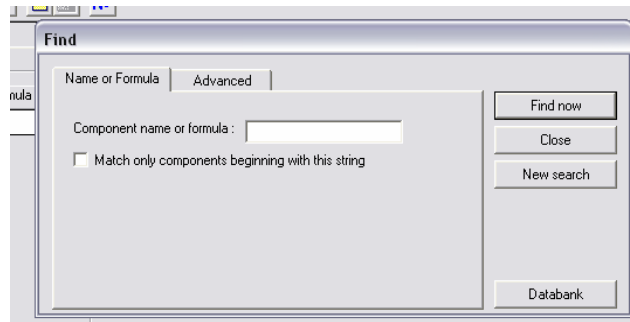
Lo primero es colocar tres corrientes materiales (Material Stream) y un separador Flash (Separador Flash2).



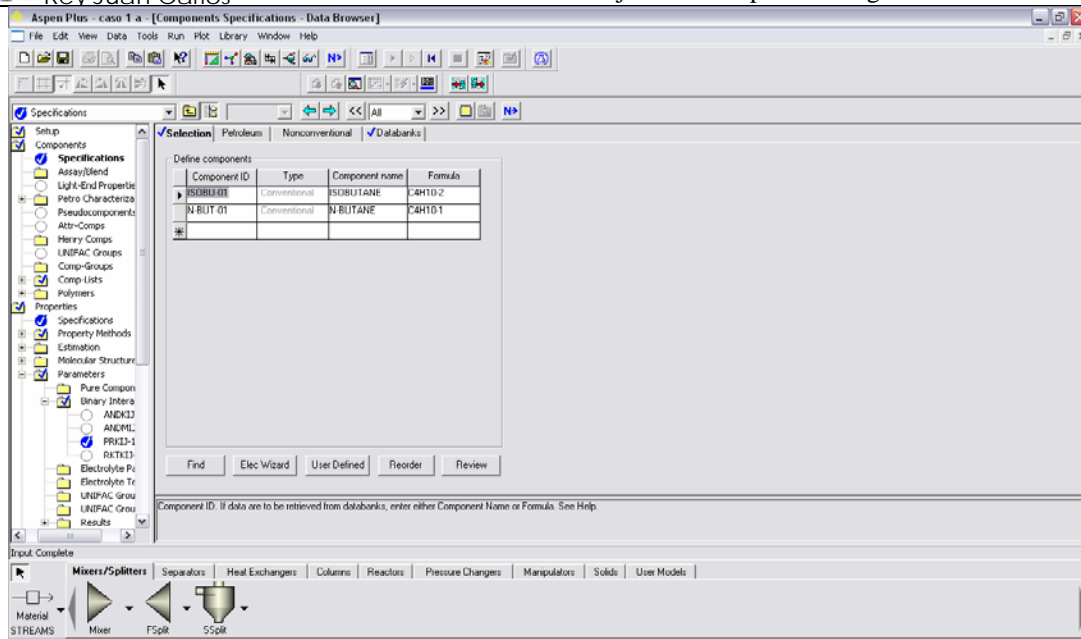
Posteriormente damos a  Next y le ponemos título al caso. Luego seleccionamos los componentes en la siguiente pantalla:



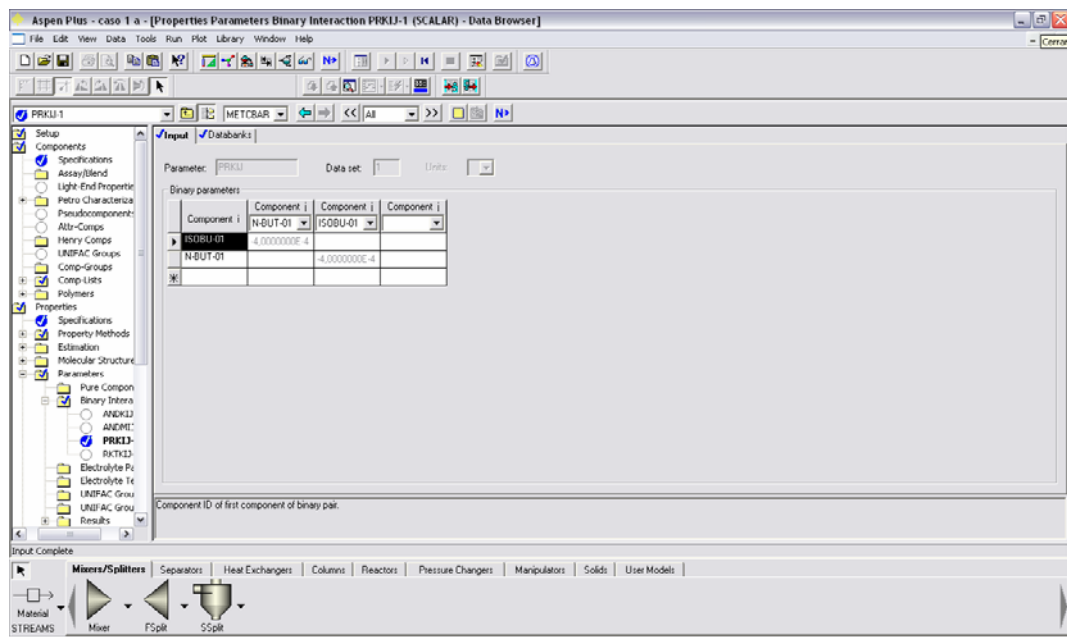
Pulsando el botón Find, podemos buscar los distintos componentes, con su nombre o fórmula en la pantalla:



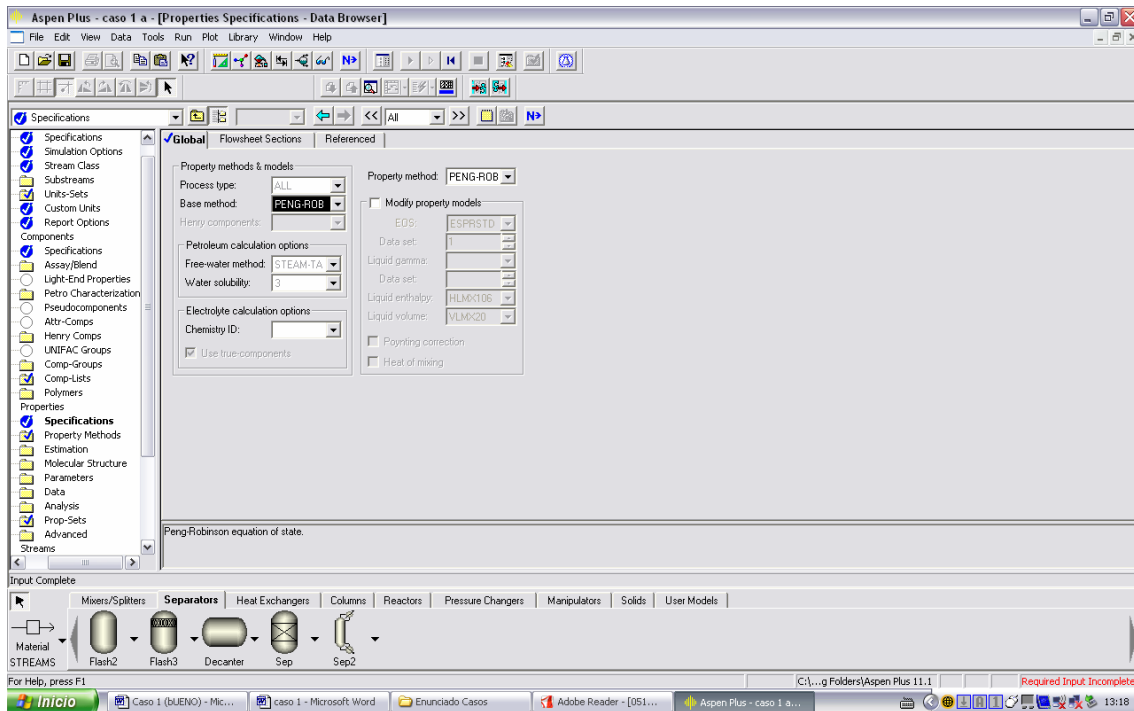
De esta forma añadimos el isobutano y el n-butano a la lista de componentes.



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.

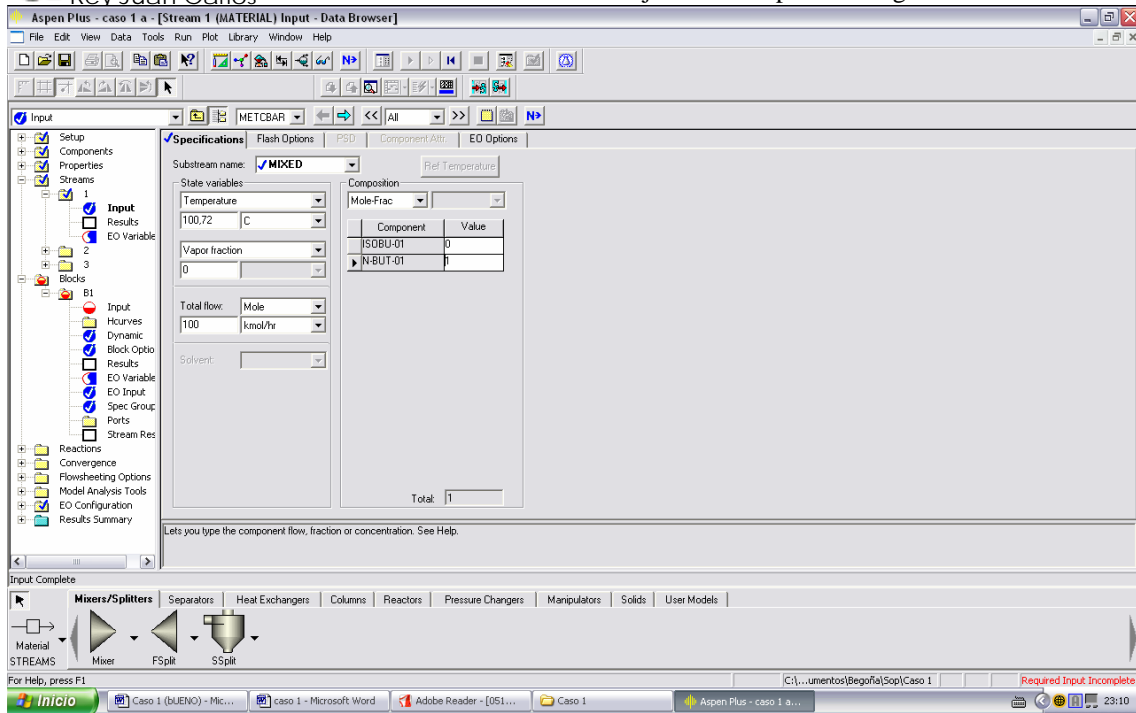


Volviendo a pulsar Next, el Aspen Plus, nos muestra la pantalla:

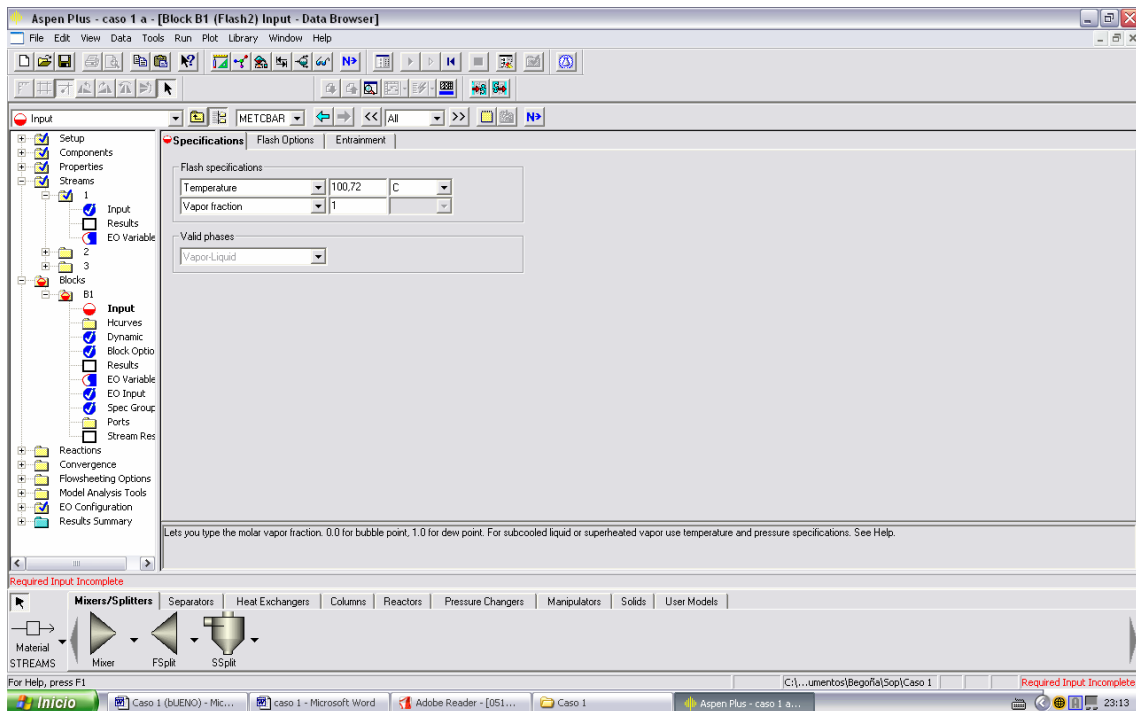


La respuesta a este mensaje será OK, a no ser que dispongamos de alguna información sobre determinadas propiedades de los componentes, que queramos introducir.

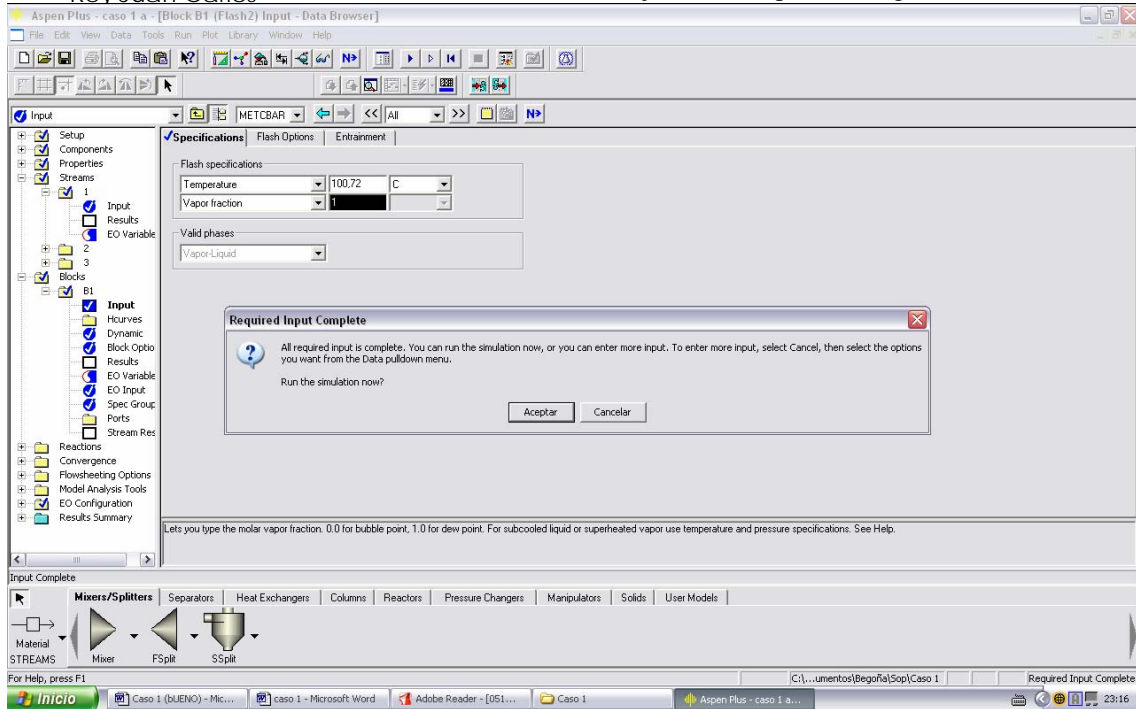
Posteriormente se indican las condiciones de la corriente de entrada. En primer lugar indicamos la temperatura, suponemos una temperatura de 100,72 °C. Posteriormente indicamos la fracción de vapor, que pondremos 0, ya que con este valor la corriente se encuentra en estado líquido. Después indicamos un caudal de alimento de 100 Kmol/h, y una composición de isobutano (se repite el procedimiento para composiciones de 0; 0,1; 0,2; 0,3; 0,4; 0,5; 0,6; 0,7; 0,8; 0,9; 1).



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



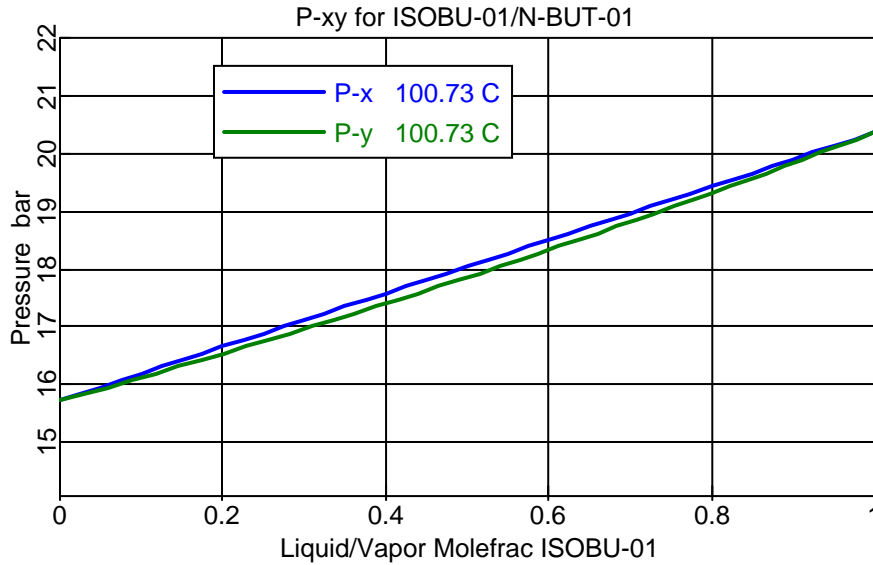
Luego damos a Next y le indicamos al programa que resuelva el caso planteado.



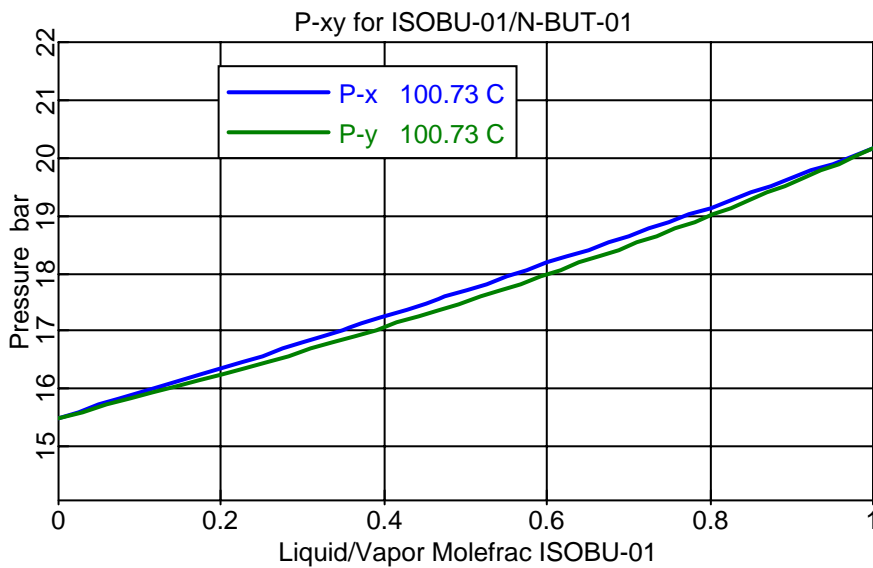
Los resultados obtenidos son:

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:



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 datos bibliográficos es la ecuación de Peng-Robinson, aunque la bondad del ajuste de la ecuación de RK-Soave es aceptable.

En general para la mayoría de los hidrocarburos no polares, la ecuación de estado PENG-ROBINSON, suele dar buenos resultados, sobre todo a temperaturas y presiones no muy elevadas (donde la idealidad del sistema es mayor).

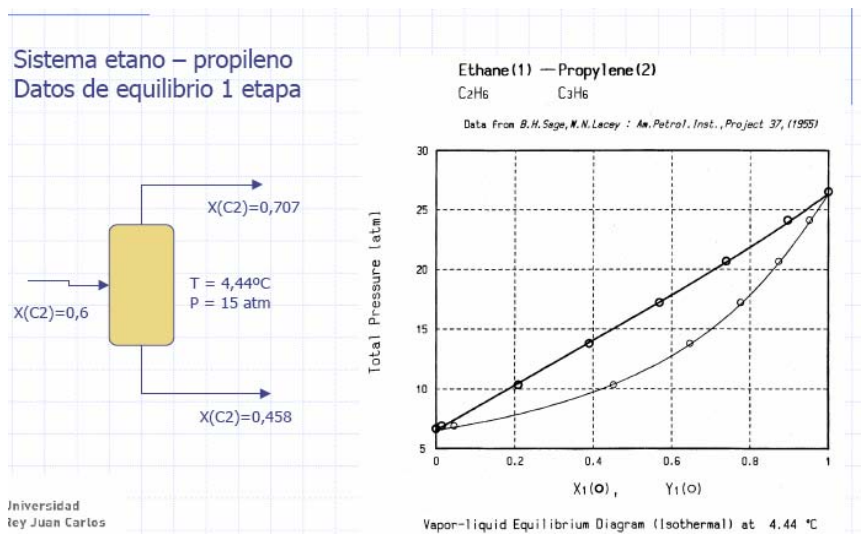
Caso 1 B

OBJETIVO:

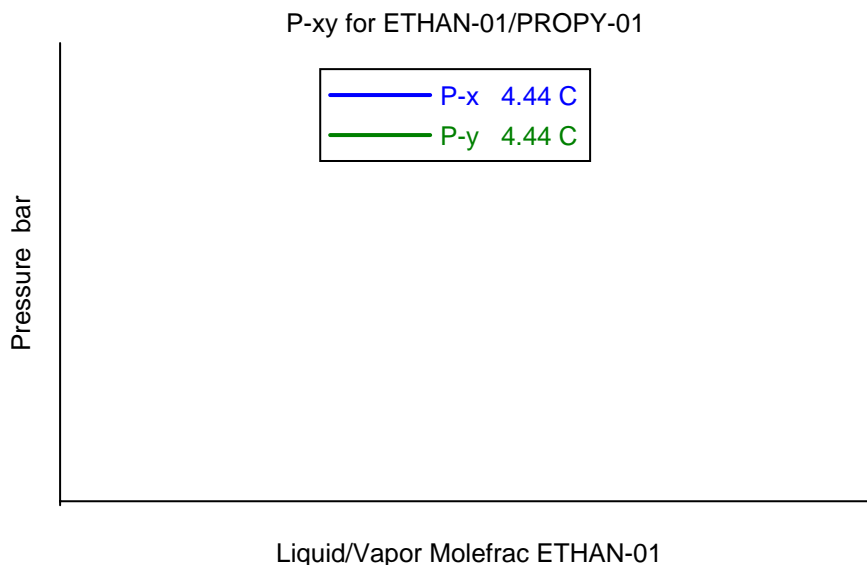
El objetivo de este caso es estudiar los modelos termodinámicos que mejor se ajustan al equilibrio de la mezcla etano-propileno.

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:

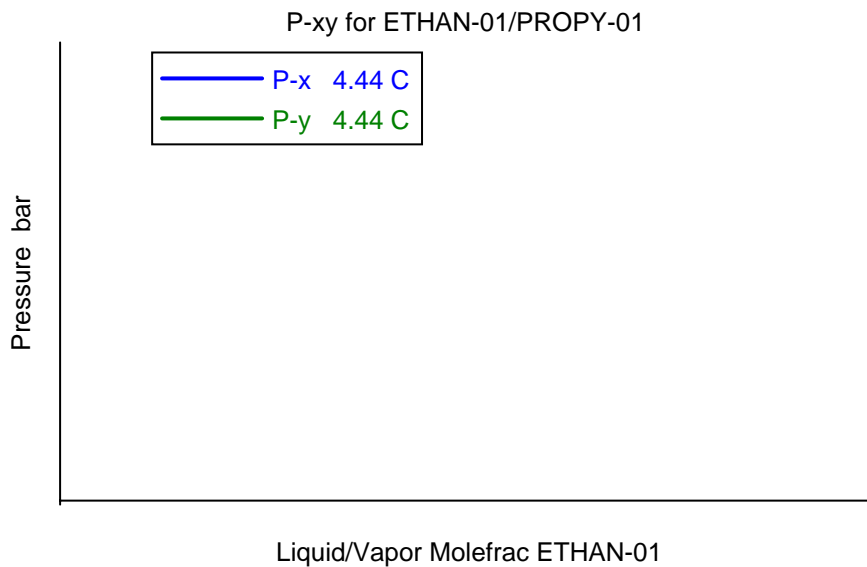


Si consideramos la separación de la corriente líquida y vapor a 4,44°C y presión de 15 atmósferas, las composiciones de las corrientes obtenidas serán:

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:

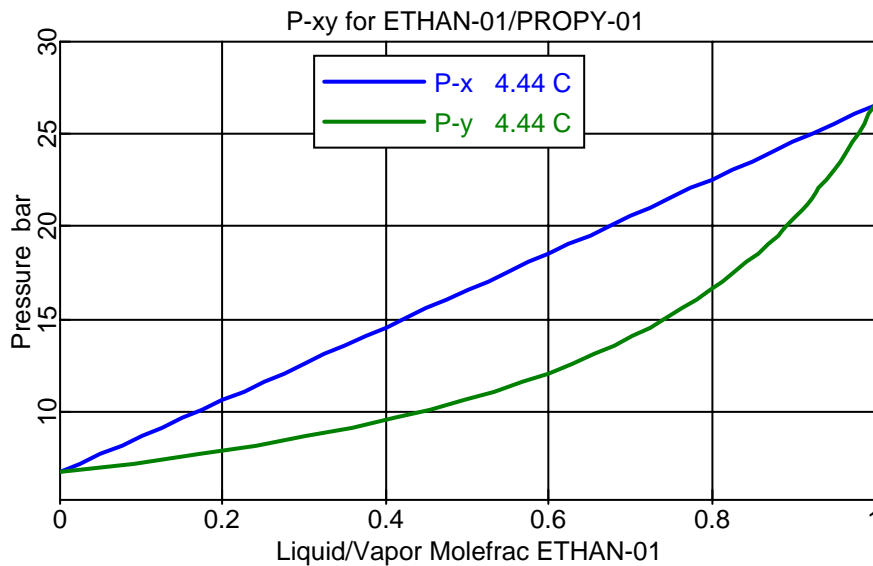


Si consideramos la separación de la corriente líquida y vapor a 4,44°C y presión de 15 atmósferas, las composiciones de las corrientes obtenidas serán:

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:



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

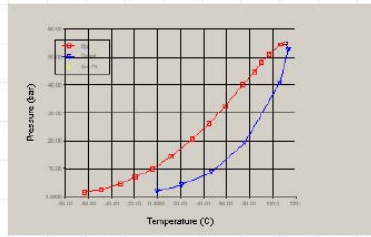
OBJETIVO:

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

PROCEDIMIENTO:

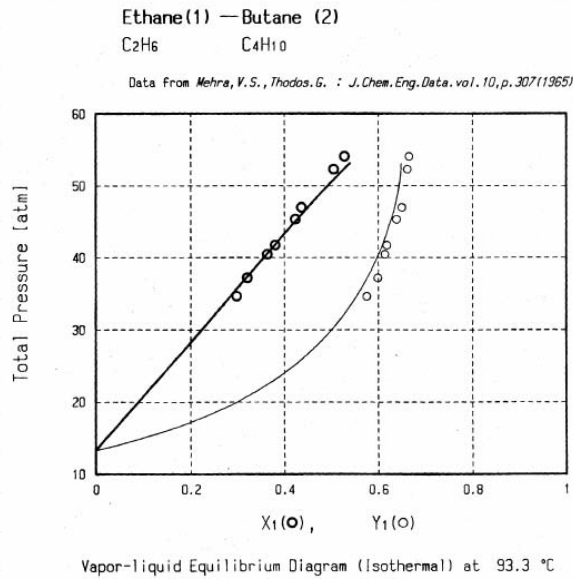
Para poder ver la bondad de los distintos modelos termodinámicos, se disponen de las gráficas de equilibrio, que se muestra en la figura

Sistema etano – butano
Envolvente fases

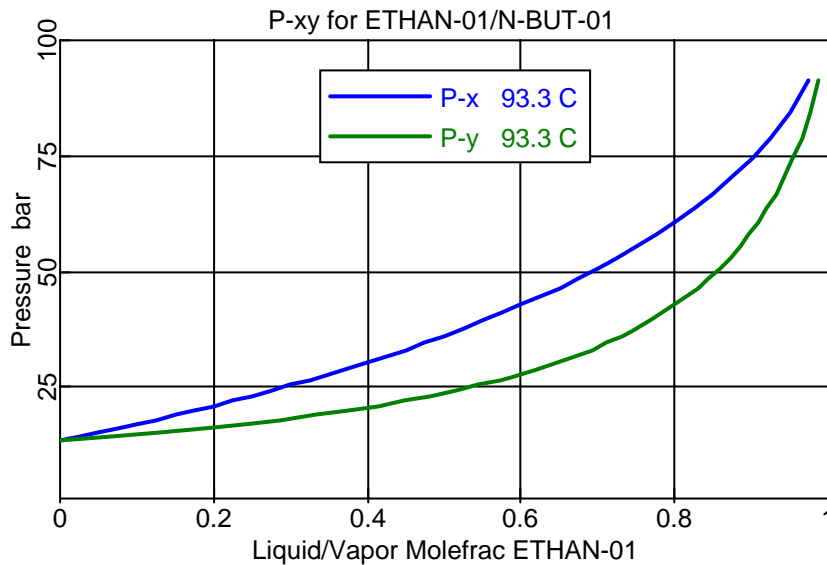


P (bar)	T (°C)
2,03	0,08
4,29	21,59
9,08	46,75
19,23	75,82
40,70	106,60
52,73	113,80
54,96	111,40

Universidad
Rey Juan Carlos

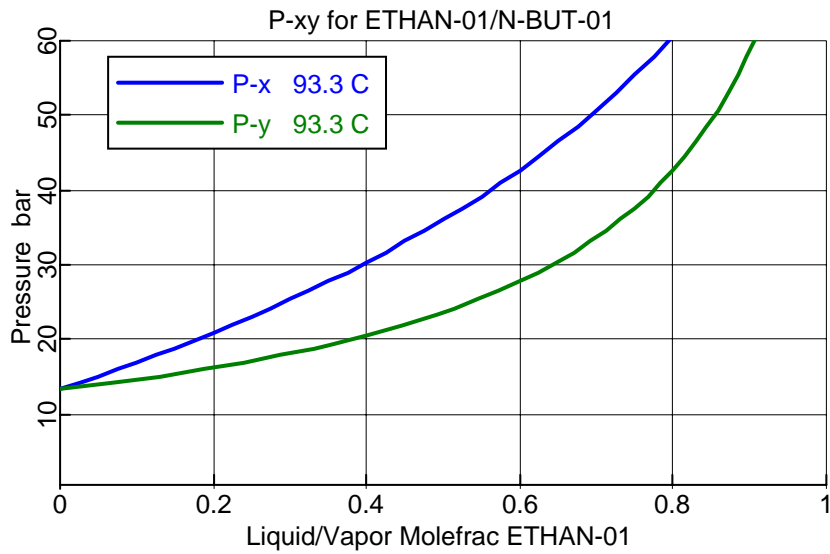


En primer lugar se ha realizado la simulación con el modelo de actividad *Unifac*. La gráfica de equilibrio se muestra a continuación:

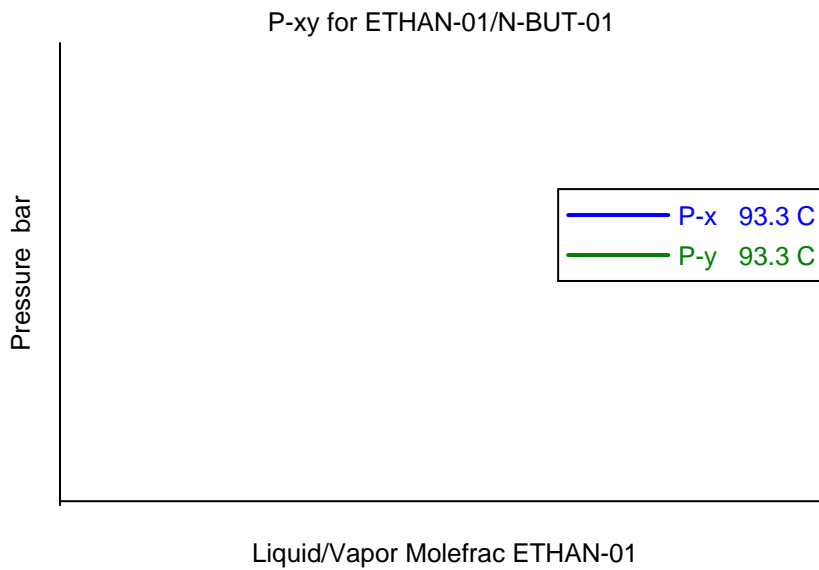


Como podemos apreciar, la gráfica presenta una forma distinta a la esperada, ya que, según los datos teóricos, las envolventes se encuentran a presiones de unas 60 atm mientras que según la simulación con el modelo de actividad Unifac se pueden llegar a presiones de unos 90 bares.

Además, para presiones de 60, con el modelo Unifac obtenemos composiciones de fracción molar de etano superiores a 0,8, mientras que los datos teóricos no dan valores de más de 0,7.



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

La base de cálculo que mejor ajusta los datos experimentales a los teóricos es la ecuación de estado Peng-Robinson.