

Equilibrio Líquido-Vapor en Mezclas Binarias: Un Enfoque Detallado Utilizando CHEMCAD en la Ingeniería de Procesos

Liquid-Vapor Equilibrium in Binary Mixtures: A Detailed Approach Using CHEMCAD in Process Engineering

David Moncada Torres¹ ; Luis Moncada Albitres² 

RESUMEN

En este artículo, se presenta un enfoque detallado sobre el equilibrio líquido-vapor en mezclas binarias utilizando CHEMCAD, una herramienta ampliamente utilizada en la ingeniería de procesos. Se explican los fundamentos del equilibrio líquido-vapor y su importancia en el diseño y optimización de operaciones unitarias. Se abordan las técnicas y métodos implementados en CHEMCAD para simular y analizar el comportamiento de mezclas binarias, destacando su relevancia en la industria química y su aplicación en la investigación de fenómenos termodinámicos en sistemas de mezclas.

Palabras clave: equilibrio líquido-vapor, mezclas binarias, CHEMCAD, ingeniería de procesos, termodinámica.

ABSTRACT

This article presents a detailed approach to liquid-vapor equilibrium in binary mixtures using CHEMCAD, a widely used tool in process engineering. The fundamentals of liquid-vapor equilibrium and its importance in the design and optimization of unit operations are explained. The techniques and methods implemented in CHEMCAD to simulate and analyze the behavior of binary mixtures are addressed, highlighting their relevance in the chemical industry and their application in researching thermodynamic phenomena in mixing systems.

Keywords: liquid-vapor equilibrium, binary mixtures, CHEMCAD, process engineering, thermodynamics.

1. INTRODUCCIÓN

El equilibrio líquido-vapor es un fenómeno crítico en la ingeniería de procesos, especialmente en la separación de componentes en mezclas binarias. CHEMCAD ofrece una plataforma versátil para el análisis y diseño de operaciones unitarias, permitiendo simular el comportamiento de mezclas binarias en condiciones de equilibrio. En este artículo, se presenta un enfoque detallado sobre el equilibrio líquido-vapor en mezclas binarias, abordando los principios fundamentales y su aplicación en la industria química.

2. DESCRIPCIÓN DEL CASO

En este caso, nos enfocamos en la mezcla binaria compuesta por etanol y n-propanol, con el objetivo de obtener datos relativos al equilibrio líquido-vapor en unidades del Sistema Internacional (SI). Además, se pretende generar gráficas correspondientes a esta mezcla utilizando el software CHEMCAD, manteniendo tanto la temperatura como la presión constantes, fijándolas en 298 K y 1 atm, respectivamente. El método empleado para obtener los Valores-K es el NRTL (Non-Random Two-Liquid) con el propósito de caracterizar y representar adecuadamente el comportamiento de esta mezcla. Este enfoque proporcionará información valiosa sobre las propiedades termodinámicas de esta solución binaria, lo que es esencial en la ingeniería de procesos y en la toma de decisiones relacionadas con la producción y separación de estos compuestos.

¹ Universidad Nacional de Trujillo, Ciudad Trujillo, País Perú. lmoncadat@unitru.edu.pe

² Universidad Nacional de Trujillo, Ciudad Trujillo, País Perú. lmoncada@unitru.edu.pe

3. MATERIALES Y MÉTODOS

Para el desarrollo de este artículo, se ha realizado la recopilación de un caso de estudio relacionado con una mezcla binaria. Este caso será simulado utilizando el software CHEMCAD, con el objetivo de obtener los datos de equilibrio líquido-vapor y generar gráficas relevantes para un análisis detallado. El procedimiento seguido para llevar a cabo esta simulación es el siguiente:

Se inició el proceso ingresando cuidadosamente los componentes específicos y las unidades de ingeniería relevantes para la mezcla binaria en el software CHEMCAD. Esta configuración permitió una representación precisa del sistema y aseguró la exactitud de los resultados obtenidos.

Posteriormente, se procedió a seleccionar el método adecuado para Valor-K, un aspecto crucial para garantizar la fiabilidad de los datos de equilibrio líquido-vapor obtenidos en la simulación. La elección del método se basó en las propiedades y características de la mezcla binaria bajo estudio.

Una vez configurados todos los parámetros necesarios, se procedió a ejecutar la simulación y se obtuvieron los datos de equilibrio líquido-vapor de la mezcla binaria. Estos datos fueron utilizados para generar gráficas TPXY, que permitieron una visualización clara y detallada de la relación entre las fases líquida y vapor en función de la temperatura y la composición.

Finalmente, se realizó un análisis exhaustivo de los resultados obtenidos. Se examinaron las gráficas TPXY y se interpretaron los datos para obtener una comprensión más profunda del comportamiento termodinámico de la mezcla binaria estudiada.

4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En el proceso de llevar a cabo el caso mencionado, seguimos el procedimiento descrito en la metodología. En primer lugar, se inicia la simulación seleccionando "New" en el menú "File" y guardando la simulación en blanco. Luego, se accede a la opción "Thermophysical" en la barra de menú y se hace clic en "Components List". A partir de la lista de componentes disponibles en CHEMCAD, se seleccionan los compuestos etanol y n-propanol, incorporándolos a la lista de componentes de interés. Este paso es fundamental para poder avanzar con la simulación y obtener los resultados relativos al equilibrio líquido-vapor en la mezcla binaria, lo que nos permitirá realizar un análisis detallado de sus propiedades termodinámicas y su comportamiento en condiciones específicas.

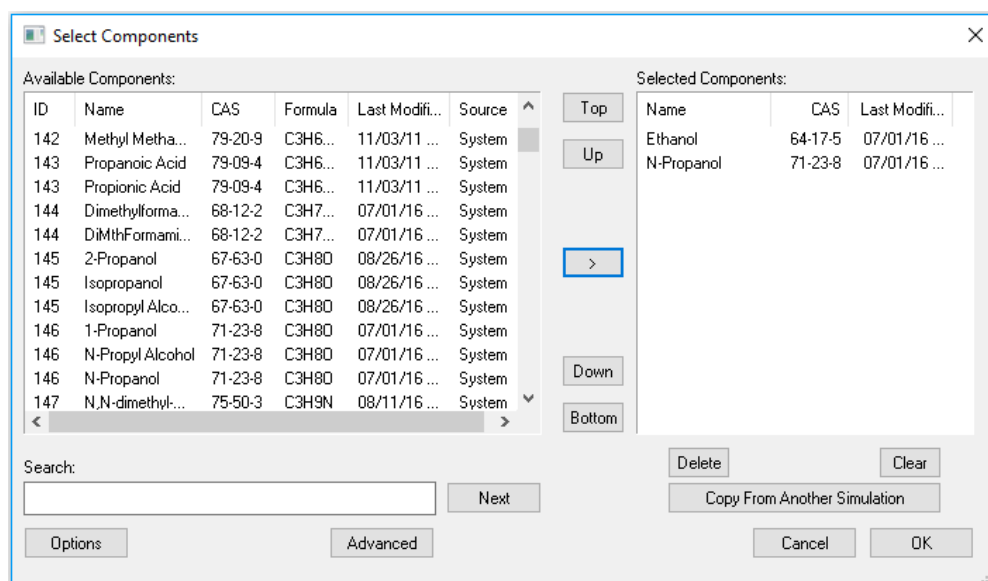


Figura 1. Ingreso de componentes

En cuanto a la introducción de las unidades de ingeniería, el proceso continúa con la selección de "Format" en el menú y, posteriormente, haciendo clic en "Engineering Units". En esta sección, se eligen las unidades de

medida apropiadas para las propiedades relevantes, incluyendo temperatura, presión y otras variables esenciales. Una vez configuradas las unidades según las necesidades del caso, se confirma haciendo clic en "OK" para proceder con la simulación. Esta configuración es crucial para asegurar que los resultados obtenidos estén en las unidades adecuadas y puedan ser analizados de manera efectiva.

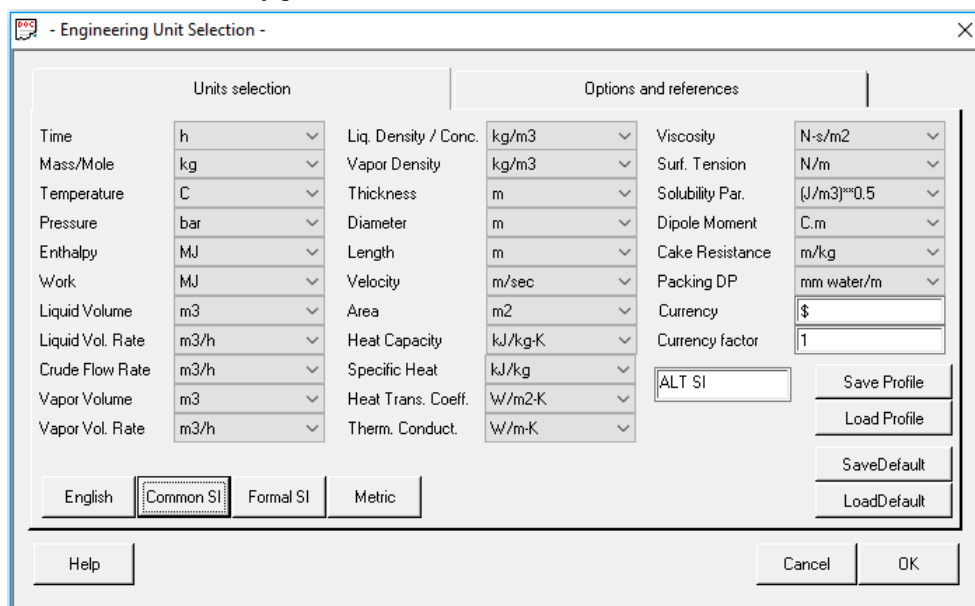


Figura 2. Ingreso de unidades de ingeniería

Para elegir el método de cálculo de los Valores-K, el procedimiento continúa seleccionando "Thermophysical" en la barra de menú y haciendo clic en "K-Values". En la lista ubicada bajo "Global K-Value Option", se selecciona "NRTL" como el método deseado. En la parte inferior derecha de la ventana, se debe asegurar que la casilla que corresponde a "Clear all local K-Values/BIP's" esté marcada. Esto tiene la función de eliminar cualquier método previo para el cálculo de los Valores-K que pueda haber sido establecido para la unidad de operación en la simulación. Los campos restantes en esta ventana no requieren configuración adicional. Este paso es esencial para garantizar la elección adecuada del método de cálculo de los Valores-K y su aplicación en la simulación.

El modelo NRTL (Non-Random Two-Liquid) es un modelo termodinámico utilizado para describir y predecir el equilibrio líquido-vapor en mezclas binarias. Este modelo se basa en una descripción más detallada y realista de la no idealidad en mezclas de componentes. A diferencia de modelos más simples, como el de Raoult o el de Henry, el modelo NRTL tiene en cuenta interacciones moleculares específicas entre los componentes de la mezcla.

Para aplicar el modelo NRTL en CHEMCAD o cualquier otro software de simulación, es necesario proporcionar ciertos parámetros de ajuste, que incluyen:

- **Parámetros de interacción binaria (BIP's):** Estos parámetros son específicos para cada par de componentes en la mezcla y describen la energía de interacción entre las moléculas de esos dos componentes. Deben ajustarse a partir de datos experimentales de equilibrio líquido-vapor.
- **Condiciones termodinámicas:** Es necesario definir las condiciones de temperatura y presión a las que se realizará la simulación. En el caso mencionado (298 K y 1 atm), estas condiciones se mantienen constantes.

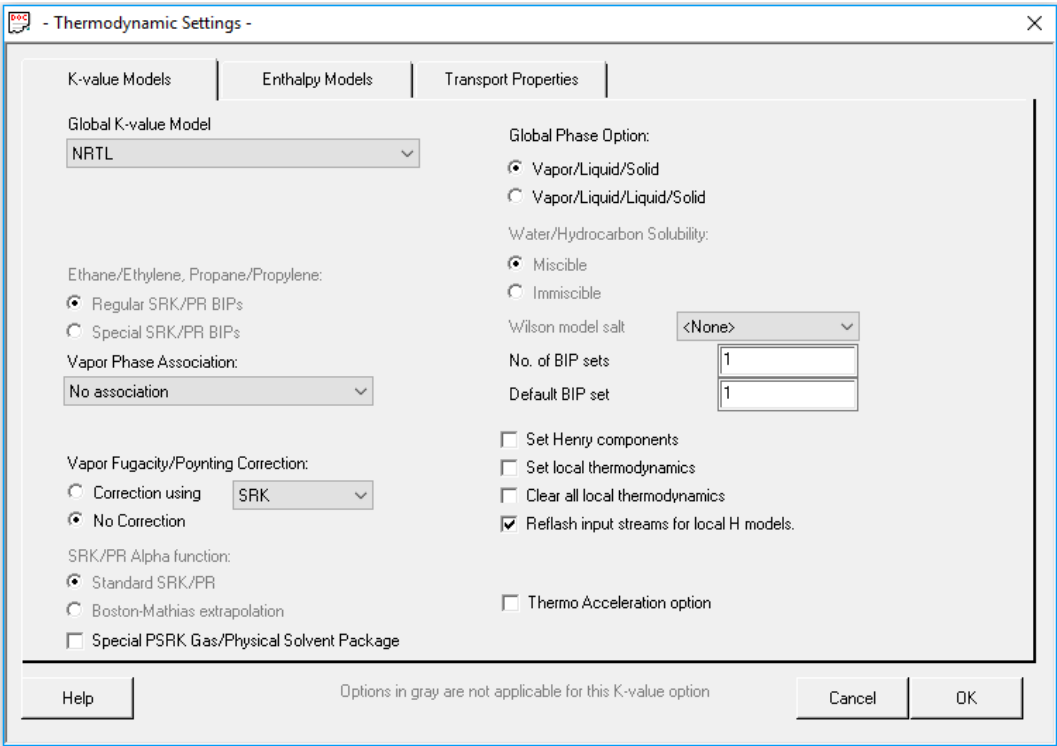


Figura 3. Ingreso de método para el Valor-K

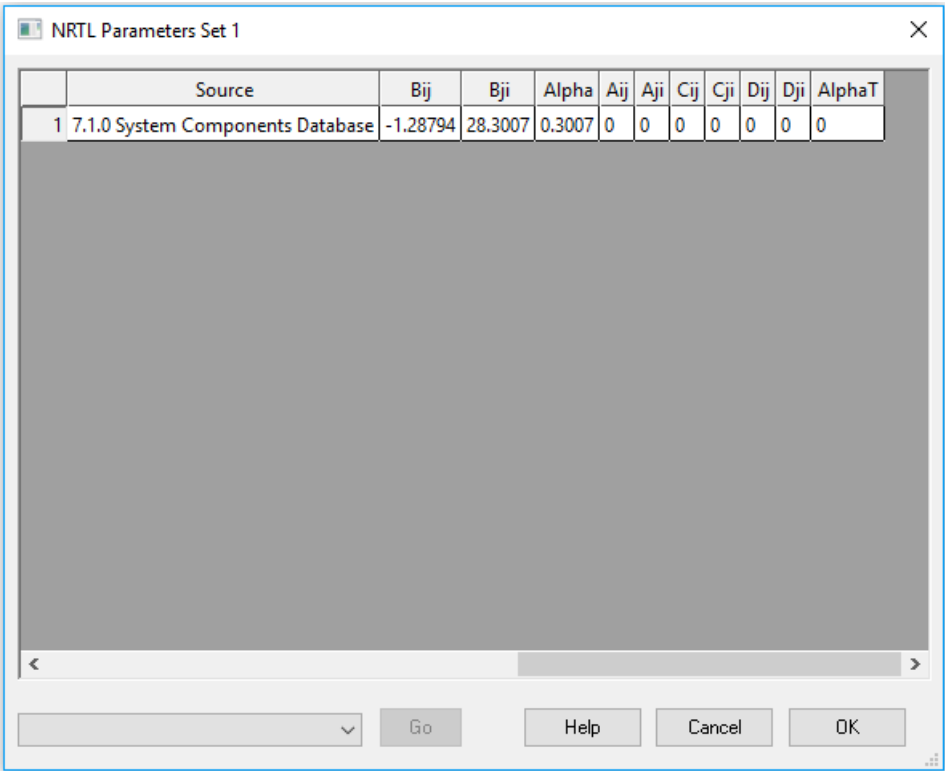


Figura 4. Ingreso de parámetros NRTL

Esta tabla indica los BIP's (Parámetros de interacción binaria) correspondientes al método NRTL. Clic sobre OK para continuar.

Para generar las gráficas TPXY debemos ir a Plot sobre la barra de menu y seleccionar TPXY.

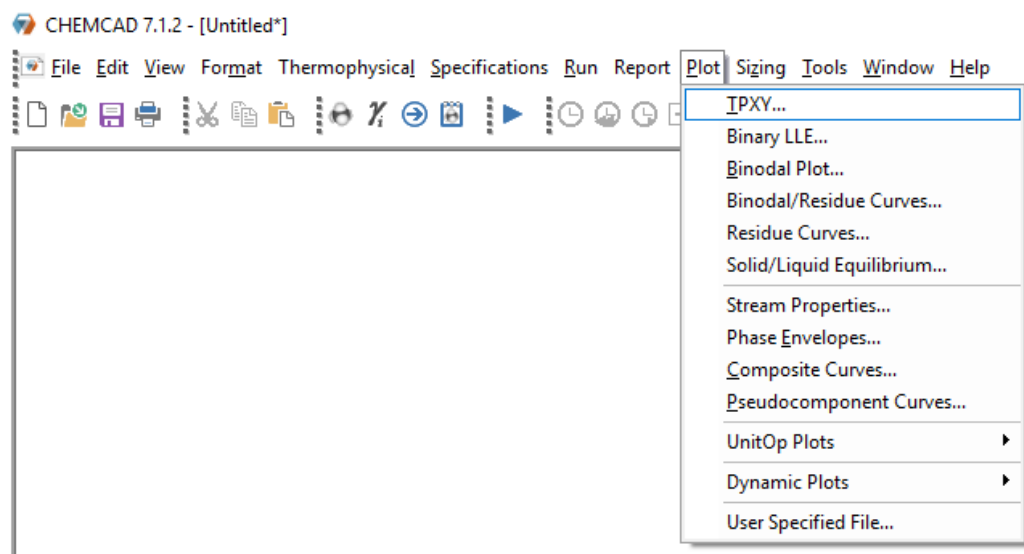


Figura 5. Creación de gráfica TPXY

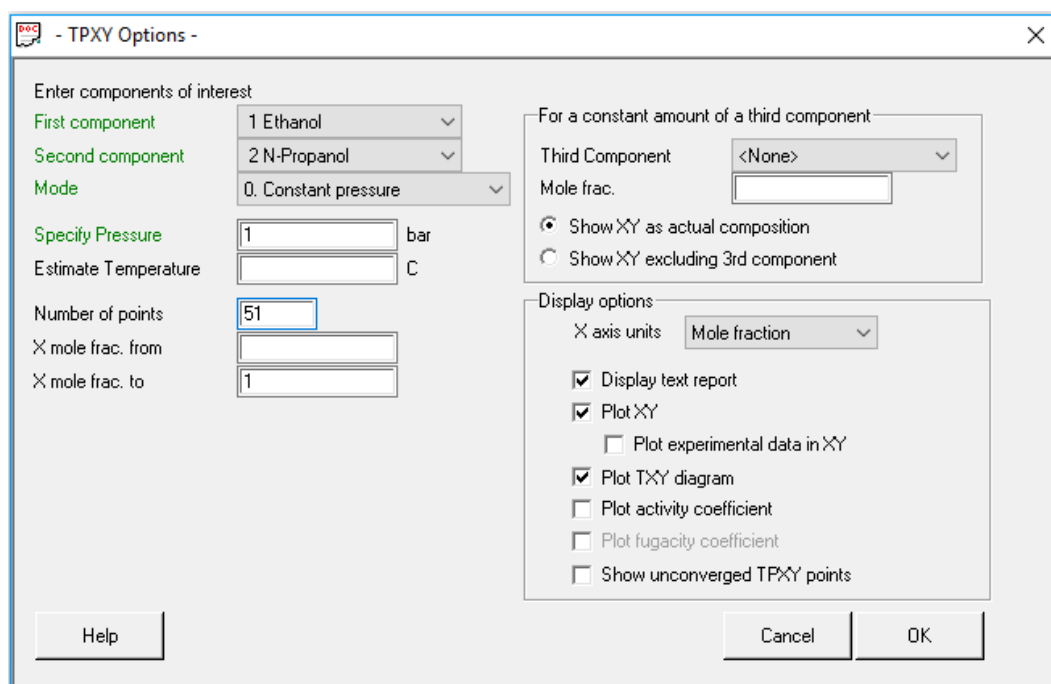


Figura 6. Parámetros de gráfica TPXY

La ventana TPXY Options (Figura 6) es una herramienta para la simulación de datos de equilibrio líquido-vapor (VLE) en CHEMCAD. Para garantizar una simulación precisa, se deben ingresar varios valores y parámetros importantes, los cuales se detallan a continuación:

- **Primer componente:** Se debe seleccionar el componente ethanol de la lista desplegable.
- **Segundo componente:** De manera similar, se debe seleccionar el componente n-propanol de la lista desplegable.
- **Modo:** Aquí se debe escoger la opción "Constant Pressure" si se están ingresando datos VLE a presión constante. En caso de tener datos VLE a temperatura constante, se debe seleccionar la opción "Constant Temperature".
- **Especificar Presión:** Si los datos VLE son a presión constante, se debe ingresar el valor de la presión, que en este caso sería 1 atm. En caso de tener datos VLE a temperatura constante, se debe ingresar la temperatura, que sería 298 K.

- **Estimar Temperatura (Estimar Presión en caso de Constant Temperature):** Este campo puede dejarse en blanco si los datos son a presión constante. En caso contrario, si los datos son a temperatura constante, se puede ingresar el valor de presión estimado.
- **Número de puntos:** Este campo indica la cantidad de puntos utilizados para graficar y reportar los datos de VLE. Se puede ingresar cualquier número en este campo, por ejemplo, 51 puntos.

Al ingresar cuidadosamente estos valores y parámetros, se obtendrán resultados precisos y confiables, el resto de campos pueden quedarse para sus valores predeterminados. Clic en Ok para finalizar. Los datos VLE aparecerán en un archivo WordPad como sigue:

CHEMCAD 5.2.0

Page 1

Job Name: Eq_L-V Date: 04/03/2005 Time: 07:23:54

XY data for Ethanol / N-Propanol

NRTL	Bij	Bji	Alpha	Aij	Aji	Cij	Cji	Dij	Dji
	-1.29	28.30	0.301	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

Mole Fractions							
T Deg K	P atm	X1	Y1	Gamma1	Gamma2	Phi1	Phi2
370.381	1.000	0.00000	0.00000	1.076	1.000	1.000	1.000
369.785	1.000	0.01961	0.04148	1.073	1.000	1.000	1.000
369.204	1.000	0.03922	0.08108	1.070	1.000	1.000	1.000
368.639	1.000	0.05882	0.11891	1.067	1.000	1.000	1.000
368.089	1.000	0.07843	0.15509	1.064	1.000	1.000	1.000
367.553	1.000	0.09804	0.18974	1.061	1.001	1.000	1.000
367.031	1.000	0.11765	0.22294	1.059	1.001	1.000	1.000
366.521	1.000	0.13725	0.25479	1.056	1.001	1.000	1.000
366.024	1.000	0.15686	0.28537	1.053	1.002	1.000	1.000
365.538	1.000	0.17647	0.31476	1.051	1.002	1.000	1.000
365.064	1.000	0.19608	0.34303	1.048	1.003	1.000	1.000
364.600	1.000	0.21569	0.37024	1.046	1.004	1.000	1.000
364.147	1.000	0.23529	0.39646	1.044	1.004	1.000	1.000

Figura 7. Resultados de la simulación

Las gráficas TPXY aparecerán en la ventana CHEMCAD como sigue:

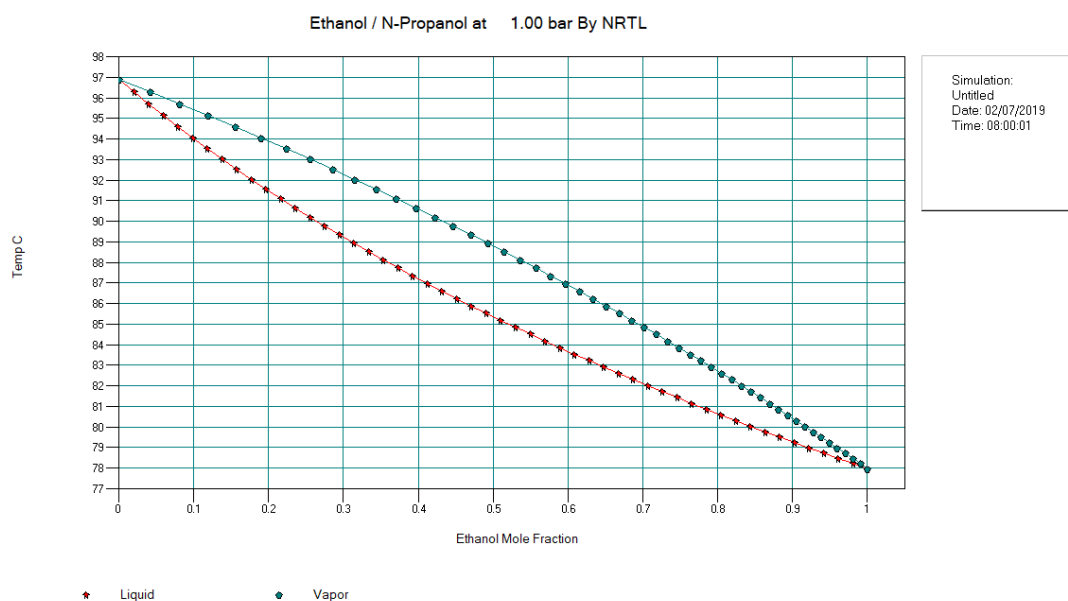


Figura 8. Gráfica TPXY

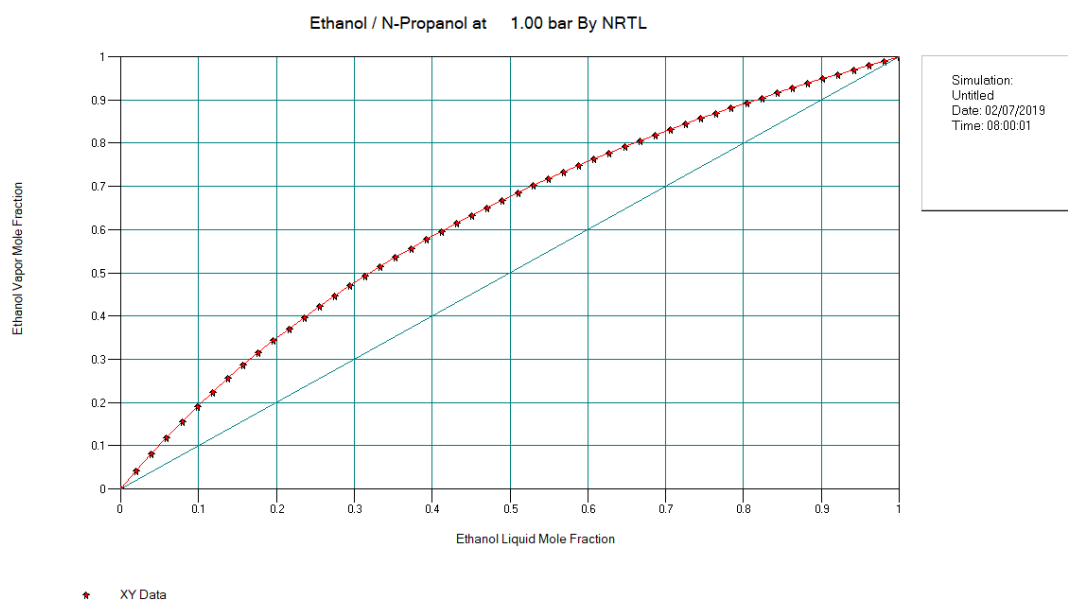


Figura 9. Gráfica TPXY

5. CONCLUSIONES

El enfoque detallado sobre el equilibrio líquido-vapor en mezclas binarias utilizando CHEMCAD es esencial para la ingeniería de procesos. La simulación y análisis de mezclas binarias en condiciones de equilibrio son fundamentales para el diseño y optimización de operaciones unitarias, como destilación, absorción y extracción, en la industria química.

CHEMCAD se convierte en una herramienta imprescindible para los ingenieros de procesos, al proporcionar una plataforma confiable y precisa para el estudio de fenómenos termodinámicos en sistemas de mezclas. La aplicación efectiva de CHEMCAD en el análisis y diseño de operaciones de equilibrio líquido-vapor permite mejorar la eficiencia, la productividad y la sostenibilidad de los procesos químicos en un entorno industrial altamente competitivo.

6. REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- Chemstations, Inc., CHEMCAD and CC - User Guide and Tutorial, Houston, Texas, USA (2005), <http://chemstations.net>
- Mane, M. B., & Shinde, S. N. (2012). Vapor liquid equilibria: A review. *Sci Revs Chem Commun*, 2(2), 158-171.
- Seyf, J. Y., & Shojaeian, A. (2019). Vapor-liquid (azeotropic systems) and liquid-liquid equilibrium calculations using UNIFAC and NRTL-SAC activity coefficient models. *Fluid Phase Equilibria*, 494, 33-44.
- Walas, S. M. (2013). *Phase equilibria in chemical engineering*. Butterworth-Heinemann.