



OBJETIVO

Familiarizarse con diferentes modelos de equilibrio líquido-vapor (K-value) disponibles en CHEMCAD y la importancia de seleccionar el modelo adecuadamente.

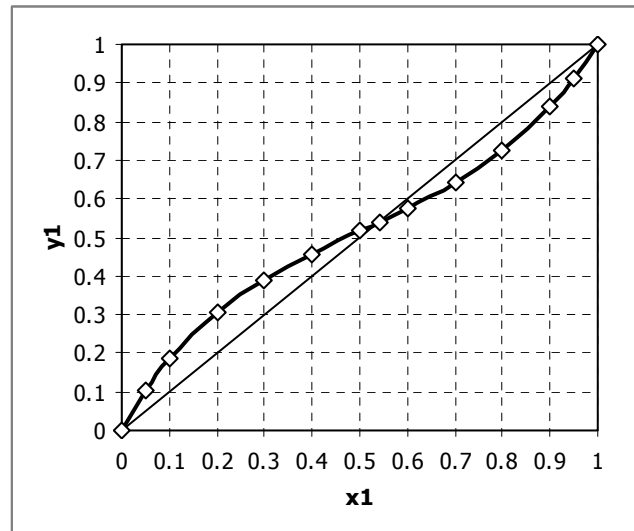
PLANTEAMIENTO

Los datos experimentales de la Tabla 1 corresponden al sistema acetato de etilo-etanol a una presión de 1 atm. El sistema forma un azeótropo con una composición de 54% mol de acetato de etilo.

Tabla 1: Datos de equilibrio L-V para el sistema acetato de etilo-etanol, 1 atm.

T [°C]	x_1	y_1
78.3	0.0	0.0
76.6	0.050	0.102
75.5	0.100	0.187
73.9	0.200	0.305
72.8	0.300	0.389
72.1	0.400	0.457
71.8	0.500	0.516
71.8	0.540	0.540
71.9	0.600	0.576
72.2	0.700	0.644
73.0	0.800	0.726
74.7	0.900	0.837
76.0	0.950	0.914
77.1	1.000	1.000

1 = acetato de etilo, 2 = etanol
Referencia: Chu, Getty, Brennecke, and Paul, *Distillation Equilibrium Data*, New York, 1950. Citado en *Perry's Chemical Engineers Handbook*, edición internacional 1999, p. 13-12.



Se desea verificar los datos de equilibrio predichos para este sistema usando diversos modelos en CHEMCAD.

PROCEDIMIENTO

Para el propósito de este ejercicio no es necesario dibujar un diagrama de flujo. Estamos interesados únicamente en obtener datos de equilibrio líquido-vapor en forma numérica y gráfica. Para esto, cambiaremos CHEMCAD al modo de simulación (Mode → Simulation).

Crear la lista de componentes (Termophysical → Component List) y agregar el acetato de etilo (Ethyl Acetate) y el etanol (Ethanol). A continuación, el "sistema experto" nos dará su recomendación para el



modelo de equilibrio líquido-vapor (K-value). Para este sistema, el modelo recomendado es NRTL (Non-Random Two Liquid). Aceptar el modelo propuesto ya que es uno de los que se verificarán.

Para obtener los datos y las gráficas de equilibrio para el sistema, utilizar Plot → TPXY (Temperatura, Presión, X y Y). En la ventana que aparece, seleccionar los compuestos: el primer compuesto será el acetato de etilo y el segundo será el etanol. Seleccionar el modo de presión constante y proporcionar la presión (1 atm o su equivalente). Para obtener buenas gráficas, aumentar el número de puntos a 50.

Enter components of interest
First component: 1 Ethyl Acetate
Second component: 2 Ethanol
Mode: 0. Constant pressure
Specify Pressure: 1.013 bar
Estimate Temperature: C
Number of points: 50
X mole frac. from:
X mole frac. to: 1
 Plot experimental data
For a constant amount of a third component
Third Component: <None>
Mole frac.:
 Show XY as actual composition
 Show XY excluding 3rd component
Axis mode: Mole fraction
Cancel OK

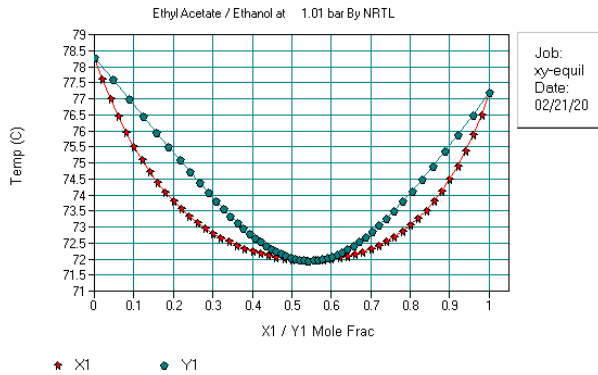
Al hacer click en OK, aparece una nueva ventana en WordPad con los datos de equilibrio en forma tabulada y dos gráficas en CHEMCAD (usar el menú Window para cambiar de una a otra).

CHEMCAD 5.5.0 Page 1
Job Name: xy-equil1 Date: 02/21/2006 Time: 09:32:13
XY data for Ethyl Acetate / Ethanol

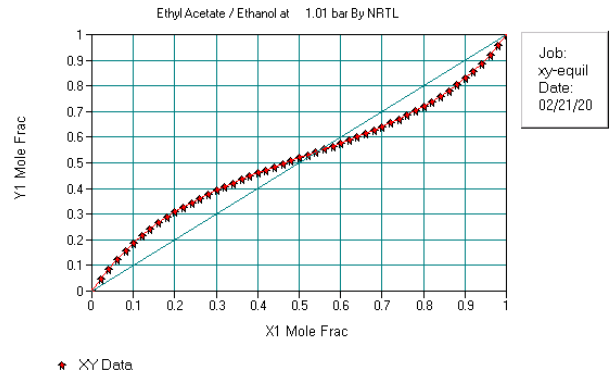
NRTL	Bij	Bji	Alpha	Aij	Aji	Cij	Cji	Dij	Dji
	154.21	162.35	0.299	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

Mole Fractions							
T Deg C	P bar	X1	Y1	Gamma1	Gamma2	Phi1	Phi2
78.303	1.013	0.00000	0.00000	2.332	1.000	1.000	1.000
77.618	1.013	0.02000	0.04577	2.257	1.000	1.000	1.000
77.002	1.013	0.04000	0.08685	2.185	1.001	1.000	1.000
76.446	1.013	0.06000	0.12389	2.117	1.003	1.000	1.000

For Help, press F1



Gráfica Txy



Gráfica xy

El azeótropo se identifica como el punto donde la temperatura es mínima o donde las composiciones del líquido y el vapor son iguales. Esta información es más fácil de obtener de los datos tabulados. Se puede observar que el modelo NRTL predice la composición del azeótropo (54% mol) y su temperatura de ebullición (71.8 °C) con bastante exactitud.

El error absoluto en los datos de equilibrio, para cada valor de x_1 , se puede estimar como:

$$\text{Error} = \left| \frac{[y_1]_{\text{Modelo}} - [y_1]_{\text{Experimental}}}{[y_1]_{\text{Experimental}}} \right| \times 100\%$$

OBTENER LOS DATOS DE EQUILIBRIO PARA LOS SIGUIENTES MODELOS, Y COMPLETAR LAS TABLAS 2 y 3

- Peng-Robinson (PR)
- Regular Solution (REGU) o Scatchard-Hildebrand
- Margules (MARG)
- UNIFAC (UNIF)
- Non-Regular Two-Liquid (NRTL)

Comentar sobre la exactitud con la que cada modelo predice la formación del azeótropo y la composición de equilibrio para este sistema.



Tabla 2. Comparación de modelos – Predicción del azeótropo.

Modelo	Temperatura azeótropo (°C)	Composición azeótropo (%mol)
Peng-Robinson		
Regular Solution		
Margules		
UNIFAC		
NRTL	71.96	0.540

Tabla 3. Comparación de modelos – Error en la predicción de la composición de equilibrio.

Datos experimentales		Peng-Robinson		Regular Solution		Margules		UNIFAC		NRTL	
$[x_1]_{Exp}$	$[y_1]_{Exp}$	$[y_1]$	Error	$[y_1]$	Error	$[y_1]$	Error	$[y_1]$	Error	$[y_1]$	Error
0.050	0.102									0.106	3.8%
0.100	0.187									0.188	0.6%
0.200	0.305									0.308	0.9%
0.300	0.389									0.393	1.0%
0.400	0.457									0.460	0.7%
0.500	0.516									0.519	0.6%
0.600	0.576									0.578	0.3%
0.700	0.644									0.642	0.4%
0.800	0.726									0.721	0.7%
0.900	0.837									0.829	0.9%
0.950	0.914									0.904	1.1%
Error Promedio:											1.0%

Para más información: El archivo de ayuda de CHEMCAD (menú Help → Help Topics) contiene descripciones breves de cada modelo y las condiciones en las que se recomienda (o no se recomienda) su uso. Buscar en Thermodynamics → K-value Models.