



EJERCICIO 2

Regresión de datos de equilibrio líquido-vapor

OBJETIVO

Conocer el procedimiento para generar parámetros de interacción binaria (BIP) para ajustar datos de equilibrio líquido-vapor.

PLANTEAMIENTO

En el ejercicio anterior, se probaron diversos modelos para equilibrio líquido-vapor y se verificó que las predicciones hechas por el modelo correspondieran con los datos experimentales reportados en la bibliografía. Se obtuvo mayor o menor exactitud, dependiendo de cuál modelo se probó.

En el caso particular del modelo de Margules, para las dos sustancias químicas en el sistema (acetato de etilo-etanol), la base de datos de CHEMCAD no disponía de dichos parámetros, por lo que aparecían ceros en la ventana correspondiente:

	I	J	Aij	Aji	Dij
1	0	0	0	0	0

El resultado fue que la composición de vapor predicha por el modelo era casi exactamente igual a la composición del líquido, y no se observaba la formación de un azeótropo.

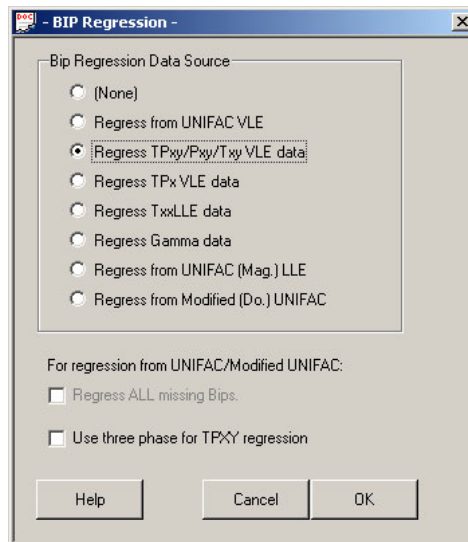
CHEMCAD dispone de una herramienta para generar estos parámetros de interacción binaria para algunos de los modelos más comunes, incluyendo el de Margules. En este ejercicio se generarán dichos parámetros y se probará nuevamente el modelo para verificar que represente correctamente el equilibrio líquido-vapor.

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.

Al igual que en el ejercicio anterior, crear la lista de componentes con el acetato de etilo (Ethyl Acetate) y el etanol (Ethanol). Cambiar el modelo termodinámico al modelo de Margules.

A continuación, acceder a la herramienta de regresión de BIPs (Termophysical → Regress BIPs). Aparece una ventana en la que se puede elegir el tipo de regresión dependiendo del tipo de datos disponibles. En el caso de este ejercicio, elegir la opción que incluye Txy, ya que se dispone de datos de temperatura (T) y composiciones en la fase líquida (x) y en la fase vapor (y).



En la siguiente ventana, se seleccionan los componentes (NOTA: contrario a lo habitual, en esta ventana se selecciona de la lista de la derecha para agregar a la lista de la izquierda). En este caso, como sólo se tienen los dos componentes de interés, se seleccionarán ambos.

A continuación aparecerá una ventana en la que se puede proporcionar una estimación inicial y límites superior e inferior para la búsqueda de los parámetros. A menos de que se tenga problemas de convergencia, generalmente se aceptarán los estimados que proporcione CHEMCAD.

Luego aparece una ventana más donde se pueden ajustar parámetros para el sistema de regresión. Éstas son opciones que generalmente no se necesitará modificar.

Entonces aparece una ventana donde se introducen propiamente los datos de equilibrio. El factor de peso (weight) se emplea para dar más importancia a algunos datos. Generalmente se asignará el valor de 1 para que todos los datos tengan la misma importancia.

Al seleccionar OK, se lleva a cabo el proceso de optimización de los parámetros. Al terminar, CHEMCAD pregunta en cuál grupo de BIPs se desea almacenar el resultado. Aquí generalmente se elegirá "1" para que se almacenen en el grupo general de toda la simulación.

Una vez llevado a cabo este proceso, reportar los valores de los parámetros obtenidos y volver a generar las gráficas xy y Txy para completar las tablas de la página siguiente.



**Parámetros obtenidos
Regresión de BIPs para el modelo de Margules
Sistema Acetato de Etilo/Etanol**

Aij	Aji	Dij

Predicción del azeótropo

Modelo	Temperatura azeótropo (°C)	Composición azeótropo (%mol)
Margules		

Error en la predicción de la composición de equilibrio

Datos experimentales		Margules	
$[x_1]_{Exp}$	$[y_1]_{Exp}$	$[y_1]$	Error
0.050	0.102		
0.100	0.187		
0.200	0.305		
0.300	0.389		
0.400	0.457		
0.500	0.516		
0.600	0.576		
0.700	0.644		
0.800	0.726		
0.900	0.837		
0.950	0.914		
Error Promedio:			