



**EJERCICIO 1**  
Modelos de equilibrio líquido-vapor

**OBJETIVO**

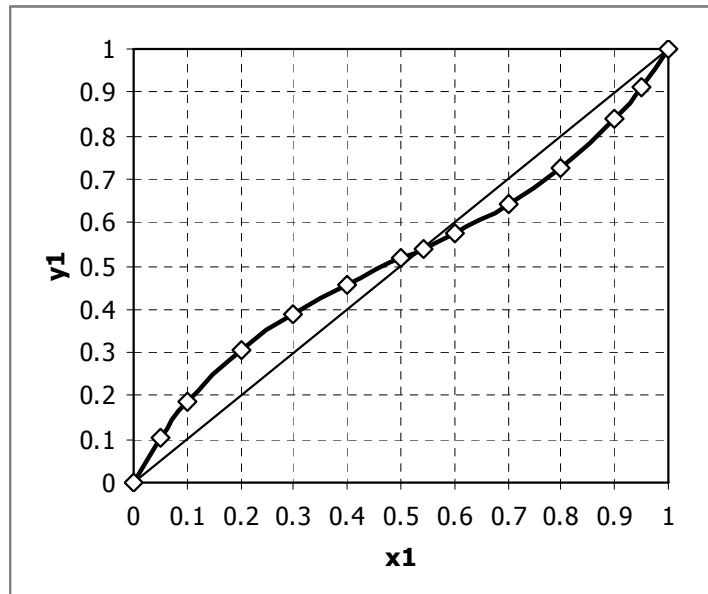
Familiarizarse con diferentes modelos de equilibrio líquido-vapor (K-value) disponibles en CHEMCAD y la importancia de seleccionar el modelo adecuadamente.

**PLANTEAMIENTO**

Los siguientes datos experimentales de equilibrio líquido-vapor 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.

$T$ [°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.

Crear la lista de componentes (Termophysical → Select Components) y agregar el acetato de etilo (Ethyl Acetate) y el etanol (Ethanol). A continuación, el "sistema experto" nos preguntará si hay algún componente que se pueda ignorar al seleccionar el modelo termodinámico y los rangos de temperatura y presión que se esperan manejar en el proceso. Para este ejercicio no será necesario modificar ninguno de estos parámetros.



En base a esta información y a los compuestos seleccionados, el sistema seleccionará un modelo para los cálculos de equilibrio líquido-vapor (K-value). Para este sistema, el modelo que recomienda el sistema es el NRTL (Non-Random Two Liquid). Aceptar el modelo propuesto ya que es uno de los que se verificarán. Luego, el sistema nos muestra las opciones para este modelo. En esta ventana también se podría cambiar el modelo termodinámico en caso de que el que se seleccionó automáticamente no se considere adecuado.

Si más adelante se desea volver a esta ventana para cambiar el modelo termodinámico, usar el menú Thermophysical → Thermodynamic settings.

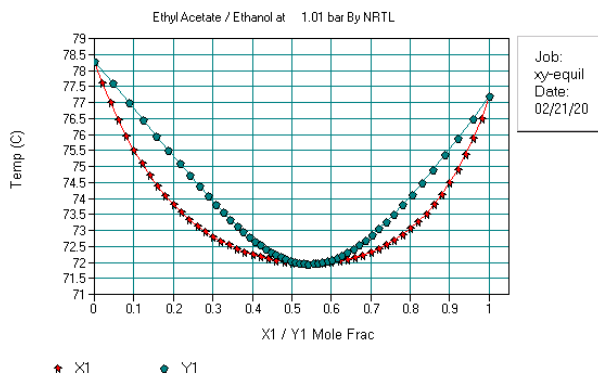
Finalmente, al cerrar esta ventana aparece otra donde se muestran los parámetros de interacción binaria (BIPs) de acuerdo a la base de datos. Los valores individuales de los parámetros de interacción también pueden ser modificados, aunque esto debe hacerse sólo en casos excepcionales y justificados. Normalmente, se aceptarán los valores que aparecen de la base de datos. Esta ventana puede ser accesada de nuevo en Thermophysical → Edit BIPs.

	I	J	Bij	Bji	Alpha
1	Ethyl Acetate	Ethanol	154.208	162.349	0.2987

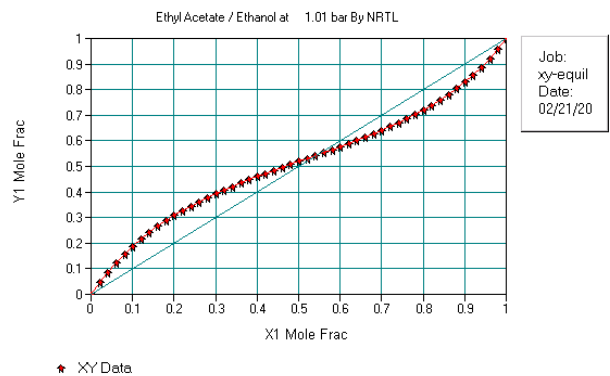


Para obtener los datos y las gráficas de equilibrio para el sistema, utilizar Plot → TPXY (Temperatura, Presión, X y Y). En la ventana que aparece, seleccionar los compuestos: el primer compuesto será el acetato de etilo y el segundo será el etanol. Seleccionar el modo de presión constante y proporcionar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

Al hacer click en OK, aparece una nueva ventana con los datos de equilibrio en forma tabulada y dos gráficas (usar el menú Window o las pestañas en la parte inferior del área de trabajo para cambiar de una a otra).



**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 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 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 SIGUIENTES**

- 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.

**Comparación de modelos – Predicción del azeótropo.**

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



**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									0.1058	3.8%
0.100	0.187									0.1880	0.6%
0.200	0.305									0.3078	0.9%
0.300	0.389									0.3930	1.0%
0.400	0.457									0.4602	0.7%
0.500	0.516									0.5193	0.6%
0.600	0.576									0.5776	0.3%
0.700	0.644									0.6417	0.4%
0.800	0.726									0.7206	0.7%
0.900	0.837									0.8293	0.9%
0.950	0.914									0.9035	1.1%
<b>Error Promedio:</b>										<b>1.0%</b>	

**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 Thermophysical → Thermodynamics → K-value Models.