



EQUILIBRIO LÍQUIDO-VAPOR DEL SISTEMA ETANOL/BENCENO: PREDICCIÓN CON MODELOS TERMODINÁMICOS

Luis Eduardo Cera Peña¹, Raymundo Sánchez Orozco^{1*}, Isaí Castañeda Morales¹

¹ División de Ingeniería Química, Tecnológico de Estudios Superiores de Jocotitlán (TESJo), Carretera Toluca-Atlacomulco Km 44.8, Ejido de San Juan y San Agustín, Jocotitlán, Estado de México 50700, México. r.sanchez@tesjo.edu.mx

En el diseño de procesos químicos es de vital importancia el entendimiento adecuado del comportamiento termodinámico de un sistema. La simulación realizada a partir de la evaluación dinámica de datos presenta múltiples ventajas para predecir propiedades termodinámicas y de transporte de fluidos con aplicaciones en la industria de procesos. En este trabajo se propone evaluar de forma isobárica el equilibrio líquido-vapor del sistema binario no ideal etanol-benceno en el rango de 80.073 - 77.123 °C a partir del uso de Aspen Plus, utilizando los modelos termodinámicos NRTL, UNIQUAC y Peng-Robinson, y comparando los resultados de cálculo con los datos experimentales obtenidos de la base de datos NIST TDE (National Institute of Standards and Technology, ThermoData Engine). Los datos generados se correlacionaron con éxito utilizando las ecuaciones de estado NRTL y UNIQUAC. La comparación de predicciones a través de los modelos revela que el primero es mejor en la representación de datos, mientras que el segundo tiene una más amplia dispersión sobre los datos experimentales. La capacidad predictiva de Peng-Robinson con los parámetros que tiene por defecto no reflejó el comportamiento real del sistema, por lo tanto fue necesaria la aplicación de una regresión no lineal a esta ecuación de estado. El sistema binario exhibió un azeotrópo de punto de ebullición mínima de 68 °C y la fase líquida, así como el vapor en equilibrio tuvieron el mismo valor de composición (XC₂H₅OH, fracción molar de etanol igual a 0.47).

Referencias:

1. Diky, V.; Chirico, R. D.; Kazakov, A. F.; Muzny, C. D. and Frenkel, M. ThermoData Engine (TDE): Software Implementation of the Dynamic Data Evaluation Concept. 3. Binary Mixtures. J. Chem. Inf. Model. 2009, 49 (2), 503-517.
2. Diky, V.; Chirico, R. D.; Muzny, C. D.; Kazakov, A. F.; Kroenlein, K.; Magee, J. W.; Frenkel, M. ThermoData Engine (TDE): Software Implementation of the Dynamic Data Evaluation Concept. 8. Properties of Material Streams and Solvent Design. J. Chem. Inf. Model. 2013, 53(1), 249-266.
3. Sedunov B. Thermal Analysis of Thermophysical Data for Equilibrium Pure Fluids, J Mod Phys. 2013, 4(7B), 8-15.