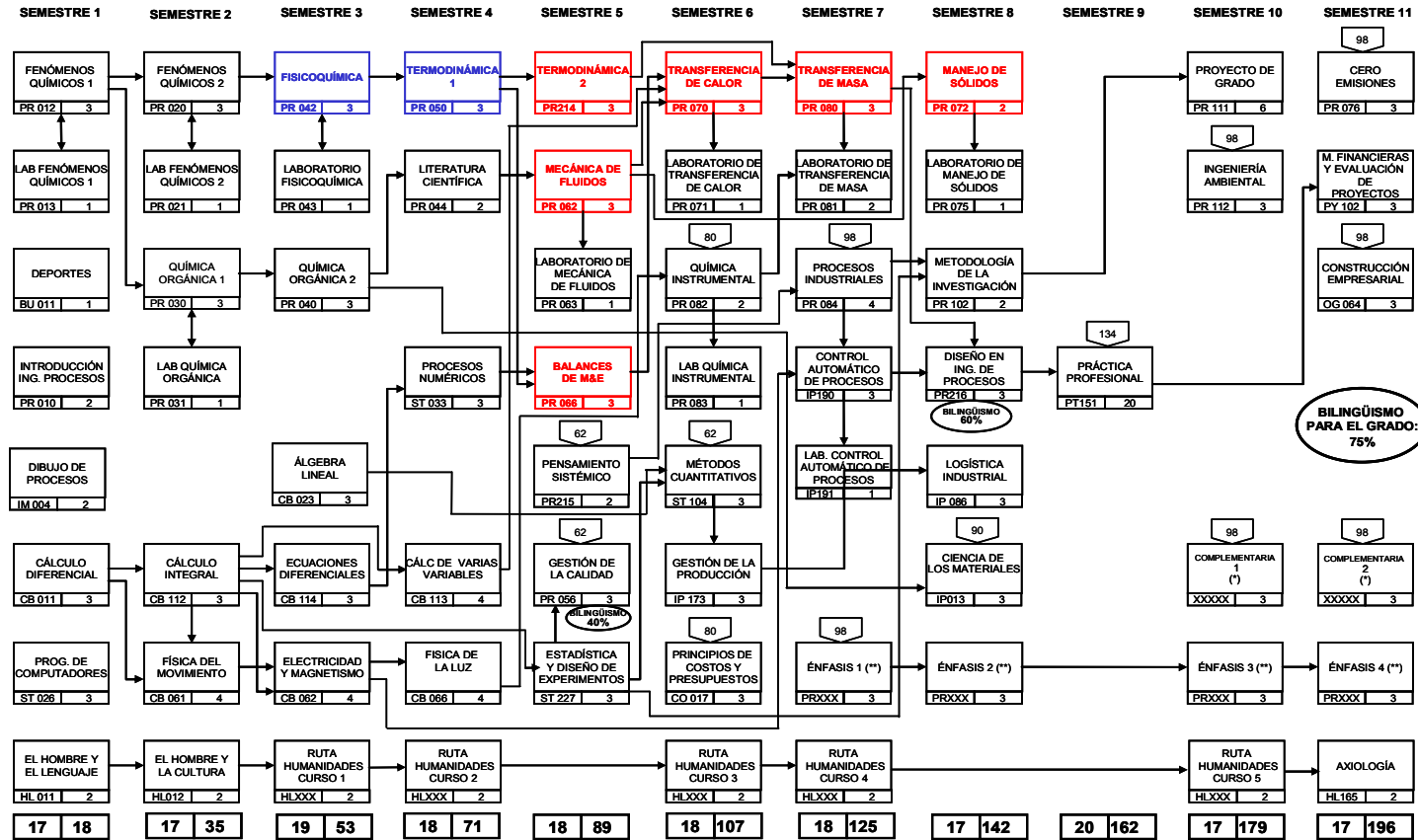


## ANEXO 1. PLAN DE ESTUDIOS DE INGENIERÍA DE PROCESOS



(\*) Complementarias de acuerdo a la reglamentación vigente (Consultar)

(\*\*) Énfasis (1 - 4): Cada Área de Énfasis puede tener diferentes pre y correquisitos



— Asignaturas en las cuales los simuladores de proceso pueden apoyar al proceso de aprendizaje

— Asignaturas seleccionadas para la construcción de una guía para los estudiantes

## ANEXO 2. ENLACES WEB DE TUTORIALES DE ASPEN

La página de Aspen Tech, en su sitio educacional (*Educational Site*), ofrece varios tutoriales a los cuales se accede mediante el password asignado a EAFIT como parte de los derechos por adquirir las licencias educativas de los software HYSYS y ASPEN.

Este sitio contiene principalmente tutoriales en temas de destilación, refinación de petróleo, procesos químicos, intercambiadores de calor y demás temas de interés para los cursos de operaciones unitarias y de diseño. Allí se encuentran también cursos, clases on-line y seminarios, pero con costo.

Para entrar en el sitio educacional busque en el menú de la página principal "[www.aspentech.com](http://www.aspentech.com)" la opción "Customer Services" y luego la opción "Education Site", o también lo puede hacer a través de los siguientes links:

Para búsqueda de tutoriales y demás ayudas en Aspen Plus:

<http://support.aspentech.com/supportpublictrain/FrameTrain.asp?ProductTrainin g.asp?id1=4&id2=&id3=all>

Para búsqueda de tutoriales y demás ayudas en HYSYS:

<http://support.aspentech.com/supportpublictrain/FrameTrain.asp?ProductTrainin g.asp?id1=2674&id2=&id3=all>

Este material sería de gran utilidad si se desea extender esta propuesta a otras asignaturas de Ingeniería de Procesos diferentes a las seleccionadas en el desarrollo de este proyecto de grado. (Ver sección 4.3).

Si se desea conocer acerca del origen de Aspen Tech y acerca de las empresas alrededor del mundo que utilizan Aspen como herramienta de trabajo, visite los siguientes links:

[http://www.aspentech.com/corporate/index\\_history.cfm](http://www.aspentech.com/corporate/index_history.cfm)

<http://www.aspentech.com/corporate/customers.cfm>

<http://www.aspentech.com/corporate/index.cfm>

Páginas consultadas en Agosto de 2006

**ANEXO 3. GUÍAS PARA LA COMPRENSIÓN DE CONCEPTOS  
FISICOQUÍMICOS Y TERMODINÁMICOS UTILIZANDO ASPEN PLUS**

**DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA DE PROCESOS  
UNIVERSIDAD EAFIT**

**FISICOQUÍMICA**

**GUÍA PARA LA COMPRESIÓN DE CONCEPTOS FISICOQUÍMICOS  
UTILIZANDO ASPEN PLUS®**

**Marcela Posada Mejía  
Ing. de Procesos EAFIT**

**Natalia Zapata Zapata  
Ing. de Procesos EAFIT**

## CONTENIDO

<b>1. OBJETIVOS GENERALES .....</b>	<b>4</b>
<b>2. SIMBOLOGÍA UTILIZADA EN ESTA GUÍA.....</b>	<b>5</b>
<b>3. PROCEDIMIENTO GENERAL PARA ENTRAR AL AMBIENTE DE SIMULACIÓN EN ASPEN PLUS Y DE PROPERTY ANALYSIS .....</b>	<b>6</b>
3.1. Pasos básicos para entrar a la simulación en ASPEN PLUS® .....	6
3.2. Pasos básicos para entrar a la interfase Property Analysis para componente puro .....	8
3.3. Pasos básicos para entrar a la interfase Property Analysis para Sistemas de dos componentes.....	11
<b>4. SISTEMAS DE UN COMPONENTE.....</b>	<b>14</b>
4.1. OBJETIVOS ESPECÍFICOS .....	14
4.2. ALGUNOS CONCEPTOS FUNDAMENTALES Y SU APLICACIÓN EN ASPEN.....	14
4.2.1. <i>Presión de vapor</i> .....	14
4.2.2. <i>Potencial químico, Energía libre de Gibbs y Estabilidad de las fases</i> .....	20
4.2.3. <i>Entalpía de vaporización</i> .....	23
4.2.4. <i>Tensión superficial</i> .....	26
4.2.5. <i>Búsqueda de propiedades para componente puro</i> .....	31
4.3. EJERCICIOS PROPUESTOS .....	33
4.4. BIBLIOGRAFÍA Y CIBERGRAFÍA.....	34
<b>5. SISTEMAS DE DOS COMPONENTES.....</b>	<b>35</b>
5.1. OBJETIVO ESPECÍFICO.....	35
5.2. ALGUNOS CONCEPTOS FUNDAMENTALES Y SU APLICACIÓN EN ASPEN.....	35
5.2.1. <i>Sistema en equilibrio</i> .....	35
5.2.2. <i>Regla de las fases de Gibbs</i> .....	35
5.2.3. <i>Diagramas de Fase para Sistemas Binarios</i> .....	37
5.3. EJERCICIOS PROPUESTOS .....	47

---

5.4. BIBLIOGRAFÍA Y CIBERGRAFÍA.....	49
--------------------------------------	----

### LISTA DE ANEXOS

ANEXO 1. MODELOS TERMODINÁMICOS UTILIZADOS EN ESTA GUÍA .....	50
ANEXO 2. ¿CÓMO ADICIONAR O ELIMINAR COMPONENTES? .....	52
ANEXO 3. LECTURA DE GRÁFICOS.....	54

## GUÍA PARA LA COMPRENSIÓN DE CONCEPTOS FISICOQUÍMICOS UTILIZANDO ASPEN PLUS®

La presente guía se realiza para apoyar el proceso de aprendizaje de la asignatura Fisicoquímica, la cual hace parte del *área de las ciencias básicas de ingeniería*<sup>1</sup>, por medio de la herramienta computacional ASPEN PLUS®

La fisicoquímica constituye una base de fundamentación para la comprensión de los conceptos asociados a las operaciones unitarias y demás asignaturas relacionadas con los procesos químicos y de diseño.

El objetivo general de esta materia consiste en “evaluar y predecir el comportamiento de las sustancias en los procesos fisicoquímicos, tanto desde el punto de vista de la dinámica de sus reacciones como de sus características en el equilibrio”.

En la presente guía se abordarán los temas “Propiedades fisicoquímicas para sistemas de un componente” y “Sistemas de dos componentes: Equilibrio de fases” los cuales hacen parte del contenido de la asignatura Fisicoquímica y cuyo entendimiento es complementado con la ayuda del simulador de proceso ASPEN PLUS® para afianzar los conceptos adquiridos en clase.

### 1. OBJETIVOS GENERALES

Como objetivos generales de las guías de aplicación de algunos conceptos básicos de las asignaturas correspondientes al *área de las ciencias básicas de ingeniería*<sup>1</sup> mediante el uso del simulador de proceso, se tienen:

- Introducir al estudiante al ambiente de simulación mediante el análisis de propiedades fisicoquímicas que ofrece ASPEN PLUS®.
- Apoyar la comprensión de algunos conceptos adquiridos en la asignatura Fisicoquímica por medio del simulador de proceso.
- Utilizar la base de datos de propiedades termodinámicas que tiene disponible ASPEN PLUS® como una aplicación diferente de la simulación de procesos.

---




<sup>1</sup> Elemento de la clasificación de las áreas del conocimiento presentada en el documento “Contenidos programáticos de la ingeniería de procesos” de Jaime Escobar Arango. 2005.

---

## 2. SIMBOLOGÍA UTILIZADA EN ESTA GUÍA

A continuación se presenta la simbología utilizada en esta guía.

SÍMBOLO	DESCRIPCIÓN
T	Temperatura
T <sub>b</sub>	Temperatura de ebullición
T <sub>fus</sub>	Temperatura de fusión
P <sub>VAP</sub>	Presión de vapor
PL	Símbolo que emplea Aspen Plus para la presión de vapor
P <sub>C</sub>	Presión crítica
T <sub>C</sub>	Temperatura crítica
G	Energía libre de Gibbs
dG	Diferencial de la energía libre de Gibbs
μ	Potencial químico
n	Moles
H	Entalpía
S	Entropía
σ	Tensión superficial
SIGMMA	Símbolo que emplea Aspen Plus para la Tensión superficial
ΔHvap	Diferencia de entalpía de vaporización
DHVL	Símbolo que emplea Aspen Plus para la diferencia de entalpía de vaporización

	Este símbolo es de advertencia, cuando lo encuentre lea detenidamente su contenido, por que se debe tener en cuenta para el análisis que se está realizando.
	Este símbolo indica ayudas computacionales, vínculos de Internet o ayudas dentro del software Aspen.
	Cada vez que vea este símbolo encontrará ideas, comentarios o ayudas conceptuales.



### 3. PROCEDIMIENTO GENERAL PARA ENTRAR AL AMBIENTE DE SIMULACIÓN EN ASPEN PLUS Y DE PROPERTY ANALYSIS

#### 3.1. Pasos básicos para entrar a la simulación en ASPEN PLUS®

A continuación se explicarán los pasos básicos para comenzar a trabajar bajo el ambiente de ASPEN PLUS®:

##### Paso 1

La ruta para ingresar a ASPEN PLUS® es:

Inicio→Todos los programas→AspenTech→Aspen Engineering Suite→Aspen Plus 2004.1→Aspen PlusUser Interface.

##### Paso 2

Al ingresar a Aspen aparece la ventana Aspen Plus Startup. Seleccione la opción Blank Simulation y presione OK




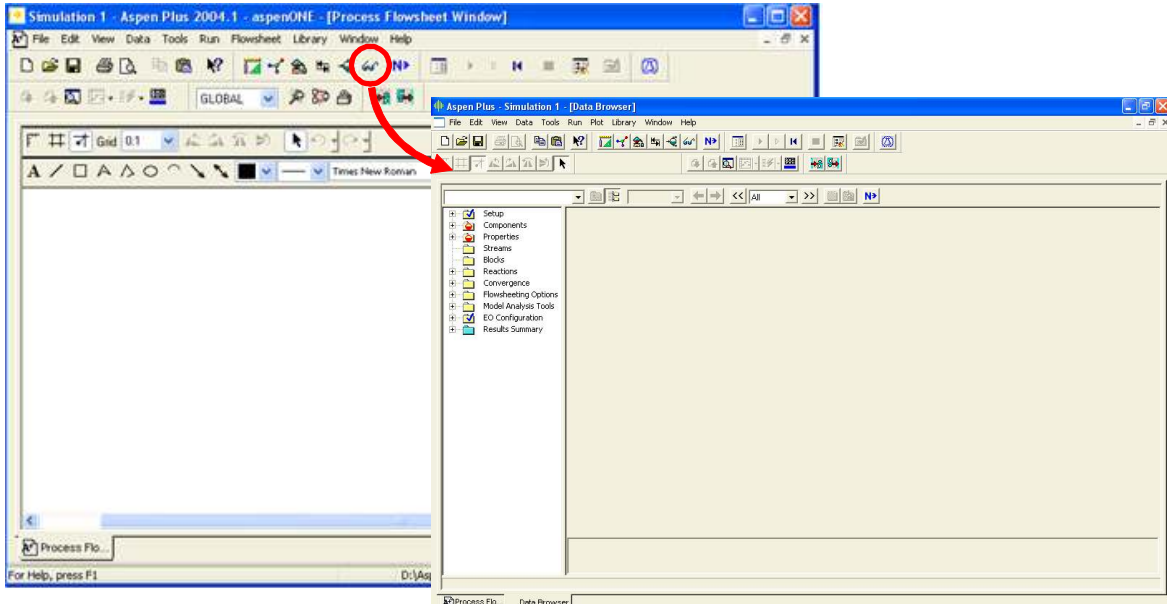
##### Paso 3

Luego aparece la ventana Connect to Engine, presione OK.



#### Paso 4

A continuación aparece la ventana principal llamada Process Flowsheet window. Seleccione el icono  ubicado en la barra de herramientas para ir a la ventana Data Browser.



El Data Browser es una ventana en la que el usuario visualiza en forma jerárquica las entradas disponibles o habilitadas de la simulación o aplicación que se desea llevar a cabo.

A partir de este paso el usuario dispone de innumerables opciones de simulación de procesos o sistemas.

Dentro del alcance de esta guía, se tiene el análisis de propiedades para sistemas puros y binarios a partir de una interfase adicional a la simulación de procesos: **Property Analysis**.

La interfase Property Analysis de Aspen Plus posee tres modos de trabajo:

- ✓ Componente puro: con el cual se realiza el análisis de propiedades termodinámicas y de transporte para sistemas de un componente.
- ✓ Sistema binario: con el cual se construyen diagramas binarios  $T_x$ ,  $P_x$  y  $Y_x$  para sistemas de dos componentes.
- ✓ Curvas de residuo: con el cual se construyen diagramas que muestran la trayectoria de la composición de una mezcla ternaria cuando es sometida al proceso de destilación con reflujo total. Estas curvas no serán abordadas en la presente guía.

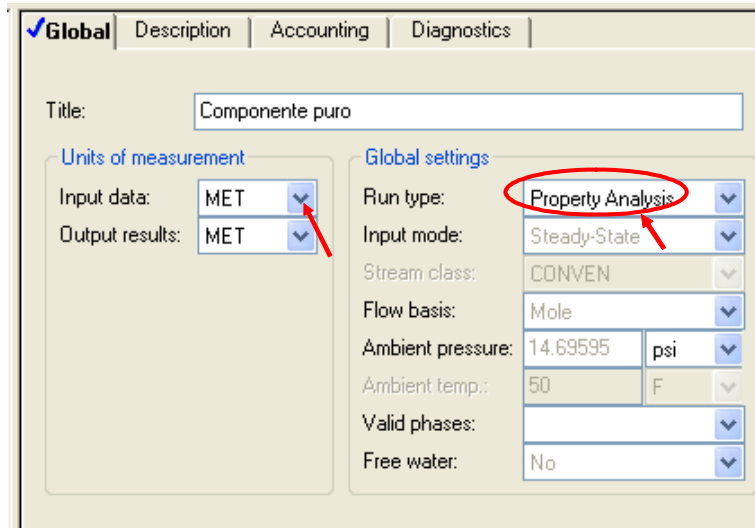
Por tanto, se explica a continuación cómo iniciar el ambiente de análisis para los dos primeros modos descritos anteriormente los cuales serán tratados separadamente en esta guía.


### 3.2. Pasos básicos para entrar a la interfase Property Analysis para componente puro

#### Paso 5

Una vez abierto el *Data Browser* ingrese, si desea, el título de la simulación. En *Units of measurement* cambie las unidades de medida a métricas (MET).

Para realizar el análisis de las propiedades debe trabajar bajo el modo “*Property Analysis*”.



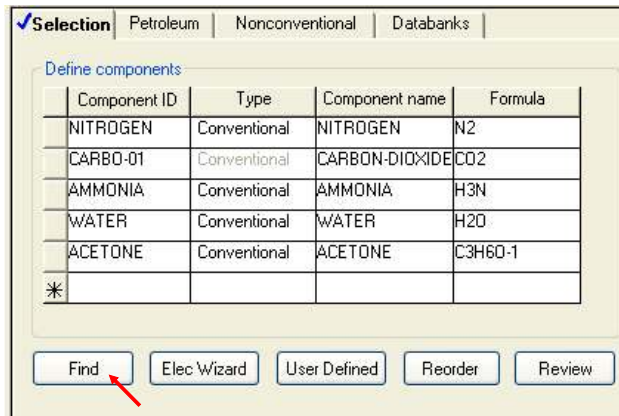
Finalmente presione “Next”  ubicado en la parte superior de la ventana del Data Browser.

#### Paso 6

A continuación, oprima *Find* para ingresar los componentes a simular:

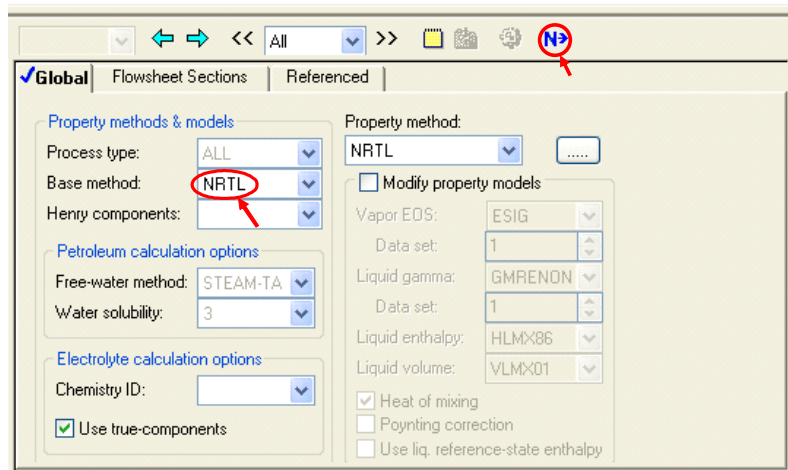
- Nitrógeno
- Dióxido de Carbono
- Amoniac
- Agua
- Acetona

Escriba cada nombre y presione .



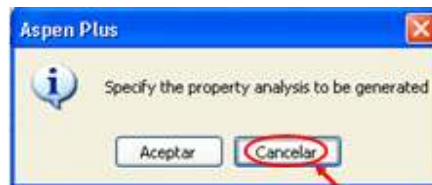
### Paso 7

Ingrese el paquete termodinámico más apropiado para el sistema. De acuerdo a los compuestos introducidos en el paso 6, escoja NRTL. (Ver **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.** para conocer más acerca de los modelos termodinámicos). Click **N**.



### Paso 8

Nuevamente oprima Next. Le aparece un recuadro de información y en este presione Cancelar.



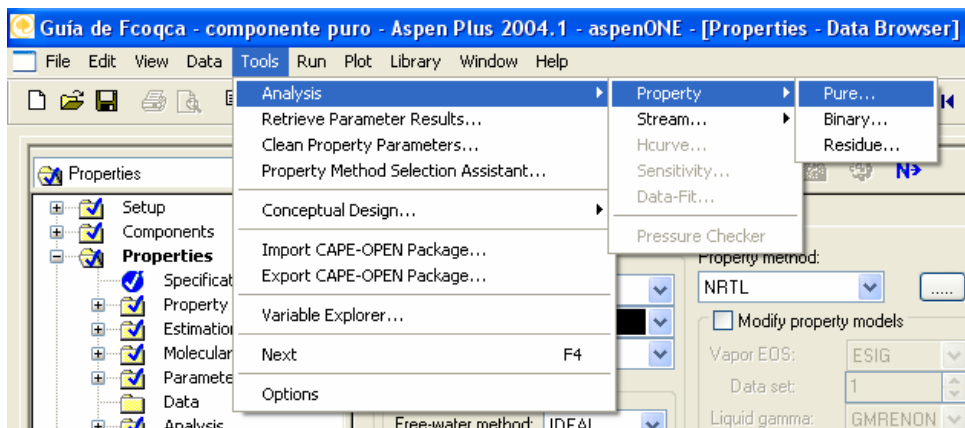
A veces, dependiendo del sistema, tendrá que presionar varias veces Next para que salga el cuadro de diálogo anterior. Aspen da la posibilidad de modificar las constantes termodinámicas y parámetros utilizados para los cálculos, para el

objetivo de esta guía, esta función no se utilizará, por lo tanto se escoge la opción Cancelar.

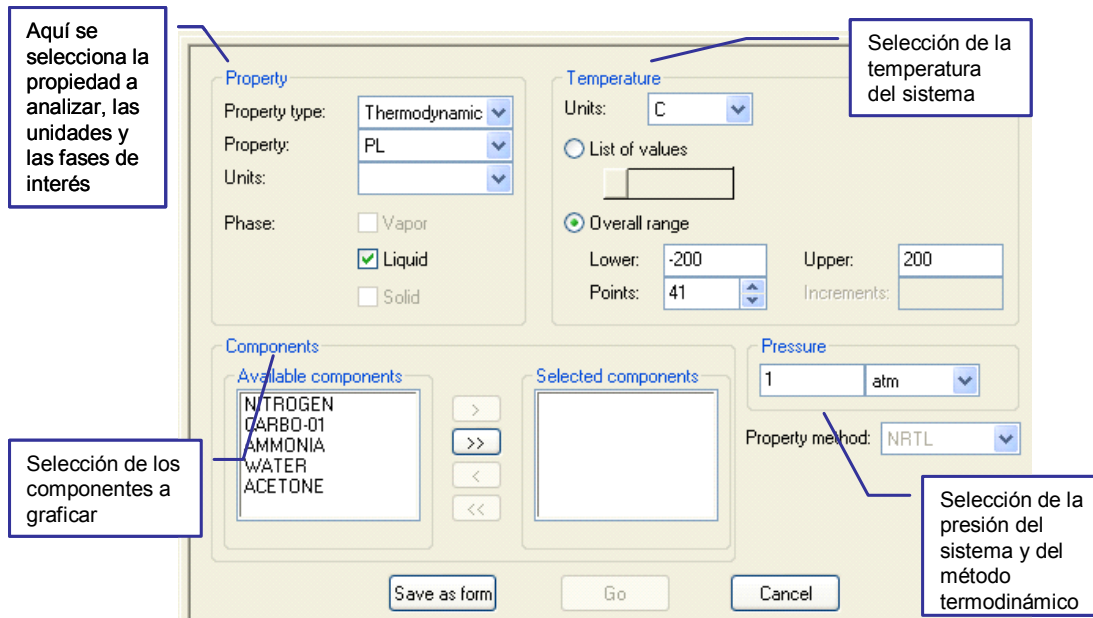
### Paso 9

A continuación siga los pasos mostrados en la ruta siguiente para entrar a la interfase de Property Analysis:

“Tools→Analysis→Property→Pure...”



Una vez realizado lo anterior, se abre la ventana que se muestra a continuación a partir de la cual se generan las gráficas de análisis de propiedades fisicoquímicas o que en el lenguaje de Aspen Plus se conocen como propiedades termodinámicas y de transporte.



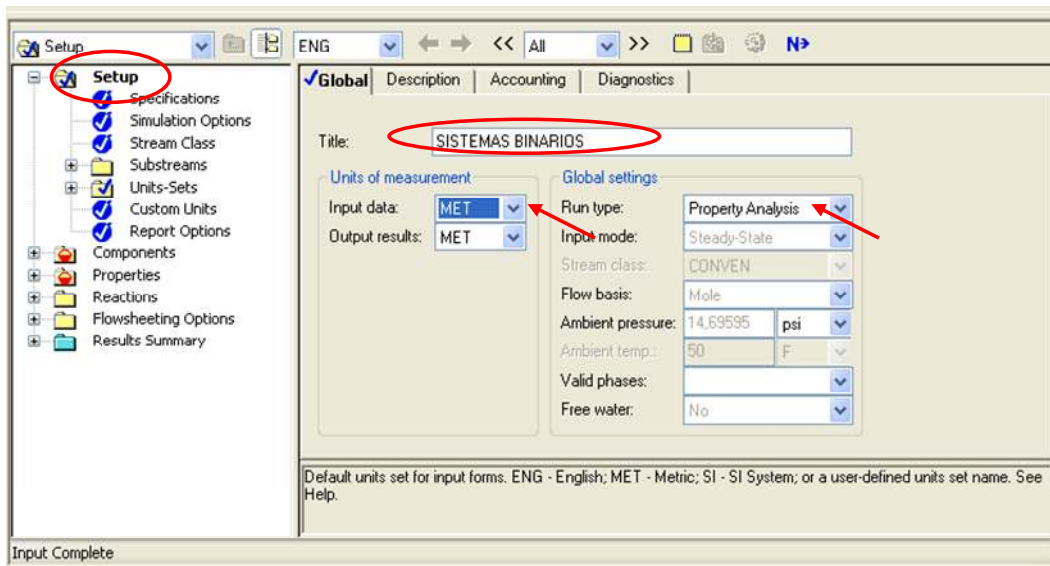
Al presionar Go se genera tanto el diagrama como una tabla de resultados.

### 3.3. Pasos básicos para entrar a la interfase Property Analysis para Sistemas de dos componentes

#### Paso 10

Una vez realizados los pasos 1 a 4, seleccione en el panel izquierdo Setup, inmediatamente aparecerá una ventana como se muestra abajo, copie el título deseado y en Run type seleccione Property Análisis. Por último en Units of measurement seleccione METCBAR para trabajar en unidades métricas. Click

N>



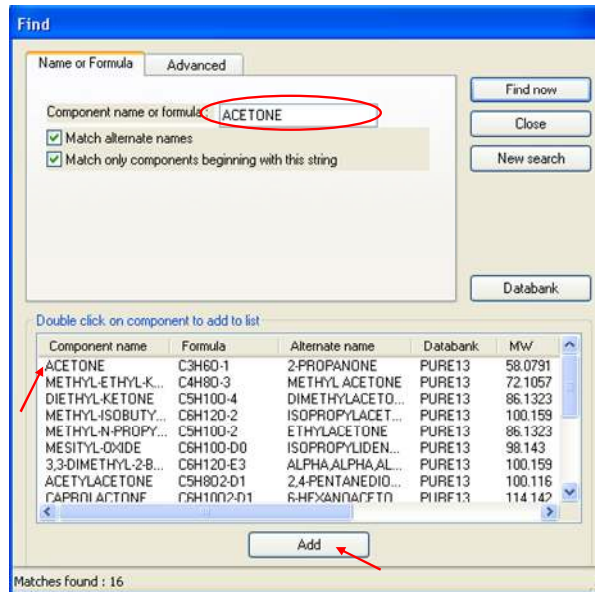
#### Paso 11

Los componentes de la mezcla binaria que se simularán son: *acetona* y *cloroformo*.


Para ingresar los componentes de la mezcla binaria presione Find y digite el nombre o la fórmula del compuesto.

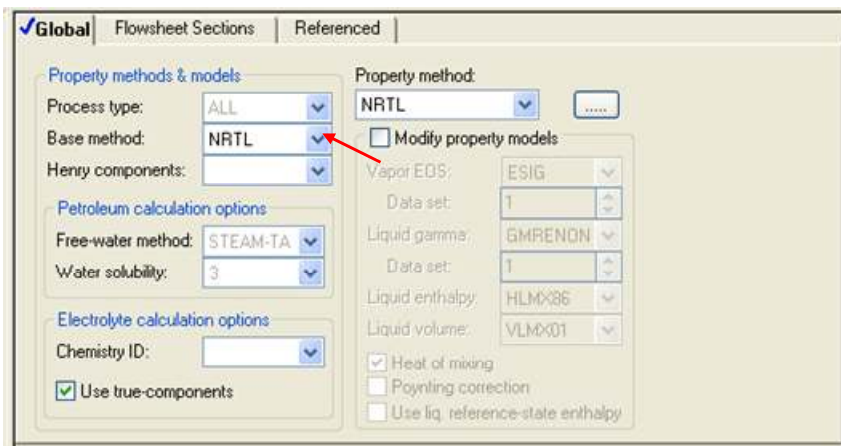
Después de escoger el compuesto deseado oprima Add. Click

N>



### Paso 12

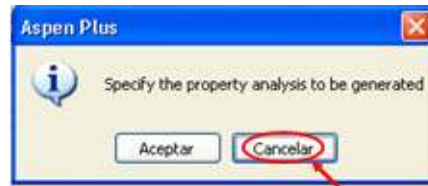
En *Base method*, escoja el paquete de propiedades termodinámicas más apropiado según los componentes del sistema. Para el sistema binario que se está trabajando utilice el modelo de NRTL (NonRandom, Two-Liquid) para generar las propiedades del equilibrio líquido-vapor. (Ver ANEXO 1 para conocer más acerca de los modelos termodinámicos). Click .



### Paso 13

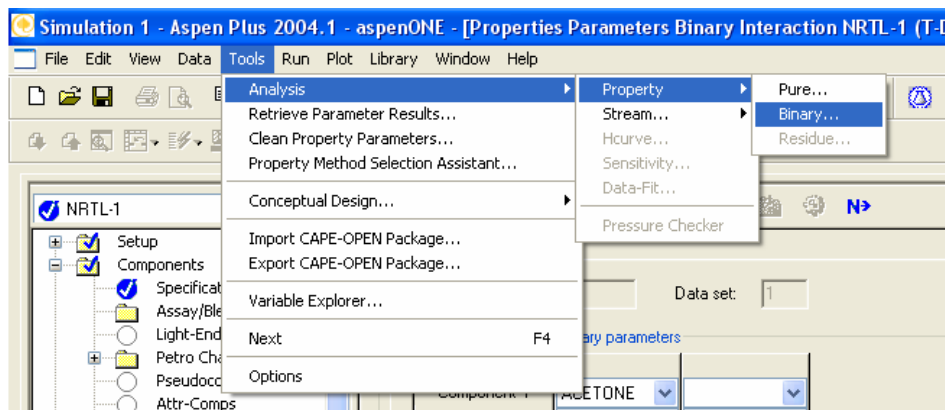
Luego de oprimir *Next*, aparece un cuadro de diálogo. Presione *cancelar*. A veces, dependiendo del sistema, tendrá que presionar varias veces Next para que salga el cuadro de diálogo.

Aspen da la posibilidad de modificar las constantes termodinámicas y parámetros utilizados para los cálculos, para el objetivo de esta guía, esta función no se utilizará, por lo tanto se escoge la opción *Cancelar*.



### Paso 14

A continuación siga la ruta siguiente: Tools→Analysis→Property→Binary



Una vez realizado lo anterior, se abre la ventana que se muestra a continuación a partir de la cual se definen las condiciones del sistema para generar los diagramas para sistema binario.

Aquí se selecciona el tipo de diagrama que se desea construir

Selección del orden de los componentes del sistema

Aquí se selecciona si los resultados se requieren en base molar o peso y se escoge el compuesto base

Selección de las condiciones del sistema.  
Para Txy: Presión y sus unidades, y Para Pxy: Temperatura y sus unidades

Si se quiere hacer el análisis a diferentes temperaturas o presiones, indique aquí los valores o el rango

Selección del método termodinámico

Al presionar Go se genera tanto el diagrama como una tabla de resultados.



## 4. SISTEMAS DE UN COMPONENTE

### 4.1. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Descubrir las propiedades de los compuestos químicos mediante la construcción de gráficas en el simulador y establecer un análisis comparativo entre ellos.
- Analizar la variación con la temperatura de las propiedades termodinámicas presión de vapor, energía libre de Gibbs y entalpía de vaporización, y la propiedad de transporte, tensión superficial.
- Identificar los puntos más relevantes de los compuestos en las gráficas de cada propiedad termodinámica y de fenómenos de superficie vs. temperatura.
- Asociar algunos fenómenos biológicos o naturales a las propiedades fisicoquímicas.

### 4.2. ALGUNOS CONCEPTOS FUNDAMENTALES Y SU APLICACIÓN EN ASPEN

A continuación se desarrollan las prácticas propuestas para la aplicación de los conceptos fisicoquímicos Presión de vapor, Energía libre de Gibbs, Entalpía de vaporización y Tensión superficial, mediante el uso del simulador de proceso ASPEN PLUS®.

#### 4.2.1. Presión de vapor

La *presión de vapor* o *presión de saturación* es la presión que ejercen las partículas de gas ubicadas sobre la superficie del líquido. El equilibrio entre las dos fases, entre el líquido saturado y vapor saturado, se alcanza más rápido cuando mayor sea la superficie de contacto entre ambas.

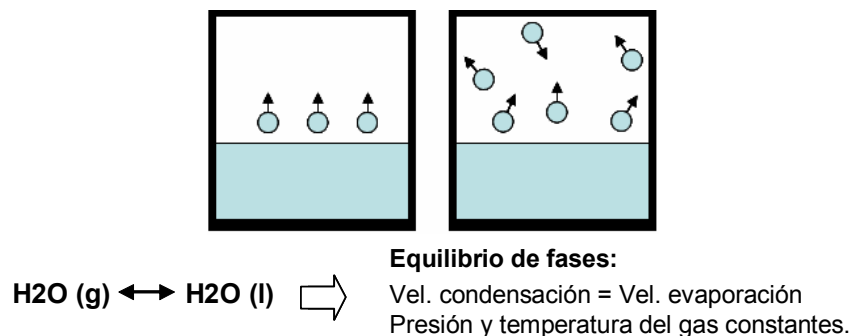


Figura 1. Presión de vapor

Imaginemos un recipiente como el mostrado en la Figura 1 con un líquido en su interior, por ejemplo agua, que se somete a una presión más baja que la atmosférica manteniendo la temperatura constante. El líquido comenzará al principio a evaporarse rápidamente hasta que se alcance el equilibrio entre ambas fases. Algunas partículas de la superficie del líquido pasarán a la fase vapor mientras que las partículas de vapor que chocan contra las paredes se irán condensando y caerán a la fase líquida.

A medida que la cantidad de vapor aumenta y por consiguiente la presión al interior del recipiente, la velocidad de condensación se incrementa hasta que las velocidades de evaporación y condensación se igualan, llegando de este modo al *equilibrio de fases*. En este punto, se ha alcanzado la presión máxima dentro del recipiente, la cual corresponde a la *Presión de vapor o de saturación*. Esta presión no se superará a menos que se incremente la temperatura. (1)

#### 4.2.1.1. Curvas de presión de vapor

La curva de presión de vapor de un líquido (diagrama inferior de la Figura 2) informa el estado de equilibrio entre el líquido y el vapor, es decir, parejas de puntos de (T, P) para los cuales existe el equilibrio entre las dos fases.

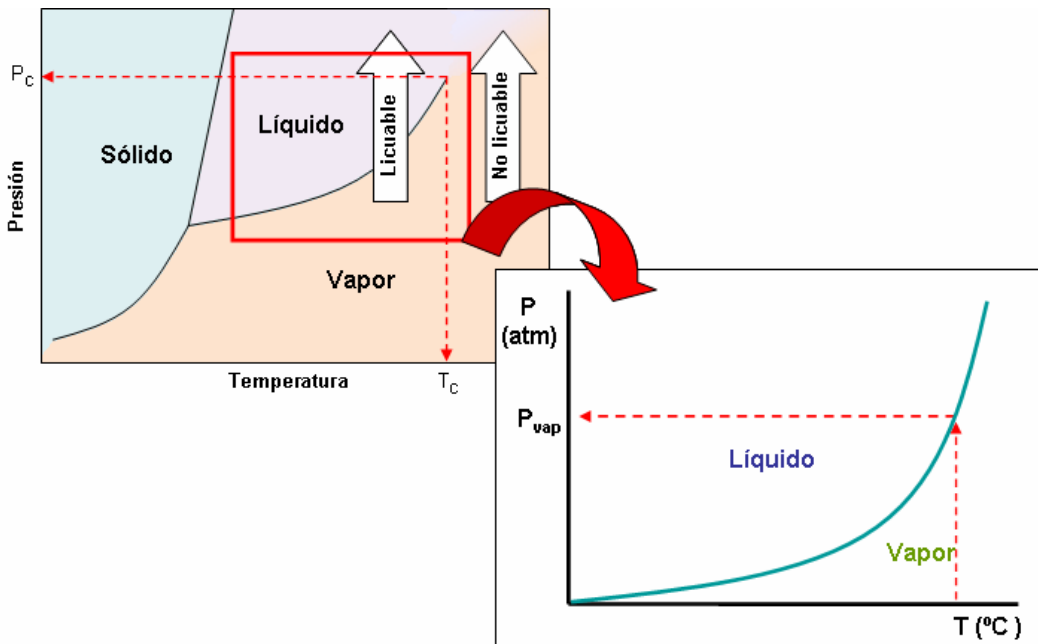


Figura 2. Curva de presión de vapor vs. Temperatura

En estas curvas se puede leer la temperatura de ebullición a varias presiones y de esta forma comprender por qué el agua ebulle más rápidamente en lugares más altos que el nivel del mar (menores a 1 atmósfera de presión) o comprender la cocción de los alimentos en la olla de presión.

Así mismo se observa cuál es la fase más estable<sup>2</sup> para una presión y temperatura determinada:

Para una P dada y  $T > T_b$  la fase gaseosa es la más estable.

Para una P dada y  $T_{fus} < T < T_b$  la fase líquida es la más estable.

Donde,

$T_b$ : Temperatura de ebullición

$T_{fus}$ : Temperatura de fusión

Adicionalmente, la Figura 2 muestra claramente que el diagrama graficado por Aspen Plus (diagrama inferior) corresponde a la línea de equilibrio líquido-vapor del diagrama de fases de la sustancia en estudio, tal como se verá a continuación en el desarrollo de la primera pregunta de análisis.



#### ¡TENGA EN CUENTA!

Aspen no simula equilibrios Sólido-Líquido ni Sólido-Vapor. Por tanto no distingue a partir de qué punto el componente se encuentra en fase sólida para una T y P del sistema determinadas.

#### 4.2.1.2. Temperatura de ebullición

La temperatura a la cual la presión de vapor de la sustancia está en equilibrio con la presión atmosférica, se denomina *Temperatura de Ebullición*. Cuando la presión externa o atmosférica es igual a 760 mm de Hg (1 atmósfera), ésta se denomina *Temperatura o Punto de Ebullición Normal ( $T_b$ )*.

#### Pregunta de análisis 4.1

*A partir de los conceptos estudiados anteriormente y mediante el uso del simulador de procesos encuentre:*

¿Cuál es el punto de ebullición normal que puede leer para cada uno de los siguientes componentes?

- a) Nitrógeno: \_\_\_\_\_
- b) Dióxido de Carbono: \_\_\_\_\_
- c) Amoniacó: \_\_\_\_\_
- d) Agua: \_\_\_\_\_
- e) Acetona: \_\_\_\_\_

<sup>2</sup> El concepto de estabilidad se define más adelante en la Sección 4.2.2.2.

Compruebe estos valores en la base de datos para componente puro de Aspen Plus. Para esto, siga el procedimiento descrito en el cuadro que se muestra después de la Pregunta de análisis 4.2.

Para realizar este análisis con la ayuda de la interfase *Property Analysis* de Aspen Plus siga los siguientes pasos:

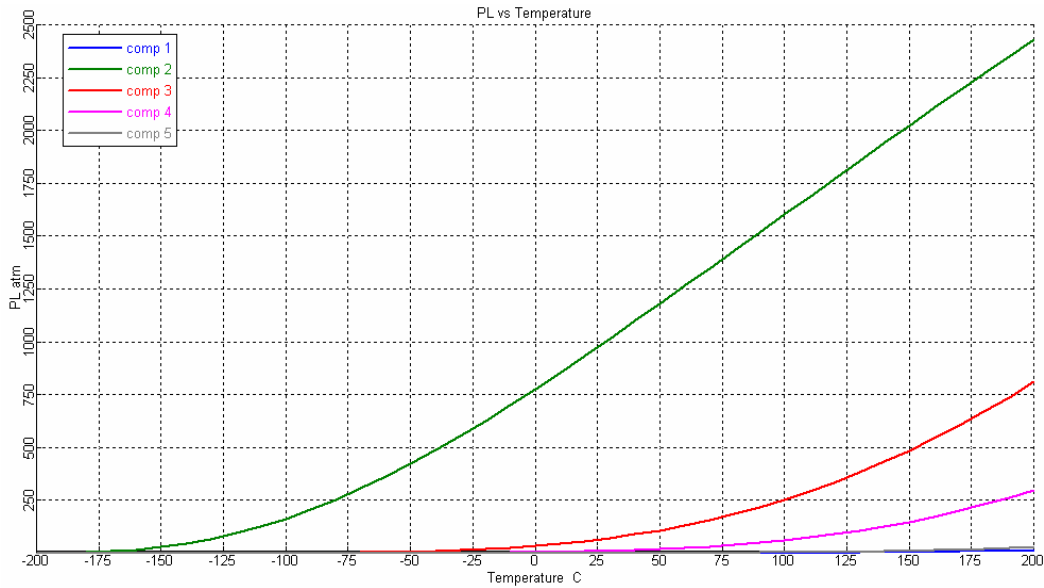
Si aún no se encuentra en el ambiente de simulación de Aspen o en la interfase Property Analysis, siga los pasos 1 a 9 de la sección 3.

Seleccione en *Property* la propiedad “Presión de vapor para componente puro”, **PL**. A continuación ingrese las unidades de la temperatura (°C) y el rango dentro del cual se desea observar la variación de la presión de vapor:  $-200\text{ }^{\circ}\text{C} < T < 250\text{ }^{\circ}\text{C}$ . Ingrese luego la presión del sistema: 1 atm.

En *Components*, seleccione el componente para el cual desea realizar el análisis y haga luego click en la flecha sencilla “>”. Si desea analizar todos los componentes en una sola gráfica, haga solo click en la doble flecha “>>”.

Tenga presente que esta interfase está diseñada para componente puro y no para mezcla de componentes, por tanto al seleccionar varios componentes usted podrá establecer una comparación de la propiedad termodinámica más no analizar la mezcla de estos.

Finalmente presione “Go” para que ASPEN muestre la curva de presión de vapor (en atm) de los componentes puros seleccionados.



**Sugerencia:** Para una mejor visualización del punto de ebullición normal para cada componente, modifique la escala de ambos ejes. Para conocer cómo realizar esta acción remítase al ANEXO 3: “Lectura de gráficos”.

## Pregunta de análisis 4.2

*Resuelva en Aspen Plus:*

¿A condiciones estándar (25 °C y 1 atmósfera de presión) en qué estado se encuentran los componentes analizados en la Pregunta de análisis 4.1?

---



---



---

Para realizar este análisis, siga el procedimiento en Aspen Plus descrito en la Pregunta de análisis 4.1.

### 4.2.1.3. Punto triple y punto crítico

**Punto triple:** Punto característico de cada sustancia en el cual coexisten las tres fases en equilibrio: Sólido, líquido y gas. Por ejemplo,

$$\text{Para el agua: } P_{PT} = 4.58 \text{ mmHg y } T_{PT} = 0.01^\circ\text{C}$$

**Punto crítico:** Al calentar un líquido éste va disminuyendo su densidad a la vez que el gas la aumenta. Ambas densidades comienzan a acercarse hasta que en el punto crítico se igualan.

El punto crítico representa la máxima temperatura y la máxima presión a la que pueden coexistir el gas y el líquido, a partir de este punto las dos fases no se distinguen y el fluido no es licuable por más presión que se aplique (Ver Figura 2). Esta condición es lo que se conoce como estado súper crítico.

Para el agua:  $T_C = 374\text{ °C}$  y  $P_C = 218\text{ atm}$



Para una visualizar una fotografía del punto triple, y ver videos sobre presión de vapor y fotos sobre otras propiedades que veremos más adelante, visita las siguientes páginas web:

[http://es.wikipedia.org/wiki/Punto\\_triple](http://es.wikipedia.org/wiki/Punto_triple)

[http://cwx.prenhall.com/petrucci/medialib/media\\_portfolio/13.html](http://cwx.prenhall.com/petrucci/medialib/media_portfolio/13.html)

Páginas web consultadas en junio de 2006

#### 4.2.1.4. Dependencia de la presión de vapor a las condiciones del sistema

El valor de la presión de vapor es independiente de las cantidades de líquido y vapor presentes y en equilibrio y sólo depende de la temperatura del líquido y de su naturaleza: A mayor temperatura, mayor presión de vapor y viceversa; y entre líquidos de naturaleza similar, la presión de vapor a una temperatura dada es tanto menor cuanto mayor es el peso molecular del líquido. Esto se explica de manera sencilla mediante la Figura 3 la cual ilustra a la izquierda lo que es una sustancia volátil<sup>3</sup> (alcohol en el licor) con presión de vapor alta y bajo peso molecular, y a la derecha otra sustancia (aceite) con peso molecular alto y baja presión de vapor.



Figura 3. Líquidos volátiles y no volátiles

<sup>3</sup> La **volatilidad** es la capacidad de una sustancia de evaporarse a una temperatura y presión determinadas.

### Pregunta de análisis 4.3

*Resuelva en Aspen Plus:*

¿Cuál de los siguientes componentes es más volátil? Ordénelos en orden de volatilidad. Responda a partir de la gráfica generada en Aspen Plus en la Pregunta de análisis 4.1.

- Nitrógeno
- Dióxido de Carbono
- Amoniaco
- Agua
- Acetona

Para realizar este análisis, siga el procedimiento en Aspen Plus descrito en la Pregunta de análisis 4.1.

---

## 4.2.2. Potencial químico, Energía libre de Gibbs y Estabilidad de las fases

A continuación se estudiarán brevemente las propiedades potencial químico y energía libre de Gibbs, cómo se relacionan y cómo definen la estabilidad de las fases.

### 4.2.2.1. Energía libre de Gibbs (G) y Potencial químico ( $\mu$ )

La *energía libre de Gibbs*,  $G$  de un sistema es la porción de energía disponible para realizar un trabajo (PV). Esta energía no es aplicable para sistemas en los que se intercambia materia con el medio ambiente, ni en procesos en donde se lleven a cabo reacciones químicas.  $G$  depende entonces de la temperatura, la presión, la naturaleza de las sustancias y de la masa presente en un sistema. (2)

El *potencial químico*,  $\mu$  puede considerarse como el potencial para desplazar materia y es la energía libre de Gibbs por cada mol ( $n$ ) presente en una fase determinada (líquido, sólido ó vapor). A diferencia de la energía libre de Gibbs, esta propiedad no depende de la cantidad de masa que hay en una fase, por tanto es posible utilizarla cuando se intercambia materia con el medio ambiente y cuando se llevan a cabo reacciones químicas (Esto ya que cuando sucede una reacción, cambia la composición de las sustancias y por consiguiente cambian las moles presentes de cada sustancia, pero al no depender  $\mu$  de la cantidad de moles, estos procesos no afectan su valor).

Según lo anterior,  $\mu$  se define matemáticamente como:

---

$$\mu \equiv \left( \frac{\partial G}{\partial n} \right)_{T,P} \quad (4.1)$$

Donde:

$\mu$ : Potencial químico  
 G: Energía libre de Gibbs  
 n: moles  
 P: Presión  
 T: Temperatura

#### 4.2.2.2. Estabilidad de fases de sustancias puras

La fase más estable (que tiene menor tendencia al cambio) es aquella que a una temperatura dada tiene un potencial químico menor que las demás fases presentes (3). Por ejemplo:

- Para  $T < T_{fus}$  →  $\mu^{sol} < \mu^{liq} < \mu^{gas}$  → La fase más estable es la *sólida*.  
 Para  $T_{fus} < T < T_b$  →  $\mu^{liq} < \mu^{sol} < \mu^{gas}$  → La fase más estable es la *líquida*.  
 Para  $T > T_b$  →  $\mu^{gas} < \mu^{liq} < \mu^{sol}$  → La fase más estable es la *gaseosa*.

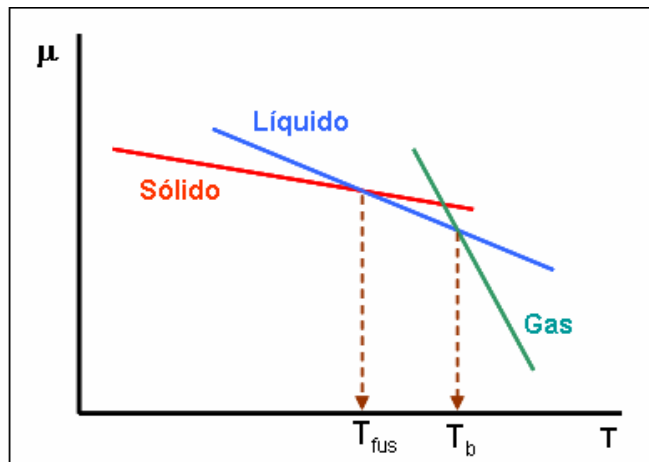


Figura 4. Estabilidad de las fases

De esta manera, la fase líquida por debajo de la temperatura de fusión es inestable y tenderá a cambiar a la fase más estable que es la sólida. En el punto en el que el potencial químico de la fase sólida se intercepta con el correspondiente al de la fase líquida, define un punto en el cuál ninguna fase tiene mayor tendencia al cambio sobre la otra. Esto define un *punto de equilibrio* (por ejemplo, el agua sólida tiene la misma tendencia de pasar a agua líquida que el agua líquida de pasar a agua sólida, o lo que es lo mismo, los potenciales del agua líquida y sólida son iguales). La temperatura a la que se da esta condición es



la temperatura de fusión o de congelamiento. Lo mismo ocurre para los potenciales de las fases líquida y vapor que en su punto de equilibrio definen la temperatura de ebullición o condensación. (4)

Entonces, resumiendo tenemos que la condición de *equilibrio entre las fases*, se da cuando el valor del potencial químico  $\mu_i$  para cada componente  $i$  es igual en cada fase (líquido, sólido o vapor) a T y P constantes, es decir:

$$\mu_i^{\text{fase sólida}} = \mu_i^{\text{fase líquida}} \quad (4.2)$$

#### Pregunta de análisis 4.4

A partir de los conceptos estudiados anteriormente y de la construcción en Aspen Plus de un diagrama G vs. T para el agua, responda:

1) ¿A qué corresponde la temperatura del punto de intersección entre las dos líneas?

---

---

2) ¿En qué punto están las fases líquido y gas en equilibrio?

---

---

3) ¿Cuál fase es estable por encima y por debajo de la temperatura de ebullición? Por qué?

---

---

Para realizar este análisis siga los siguientes pasos en el simulador Aspen Plus:

Si aún no se encuentra en la interfase de *Property Analysis*, repita los pasos 1 a 9 de la sección 3.

Luego, en *Property* seleccione la propiedad **G** (Energía libre de Gibbs).

A continuación, ubíquese en *Phase* y seleccione las opciones: *Liquid* y *Vapor*; luego en *Components* seleccione *Water* y adiciónelo con la flecha sencilla (>).

Ingrese las unidades de la temperatura (°C), el rango: 0 °C < T < 250 °C y la presión: 1 atm. Finalmente presione G<sub>o</sub> para graficar G (cal/mol) vs. Temperatura (°C).

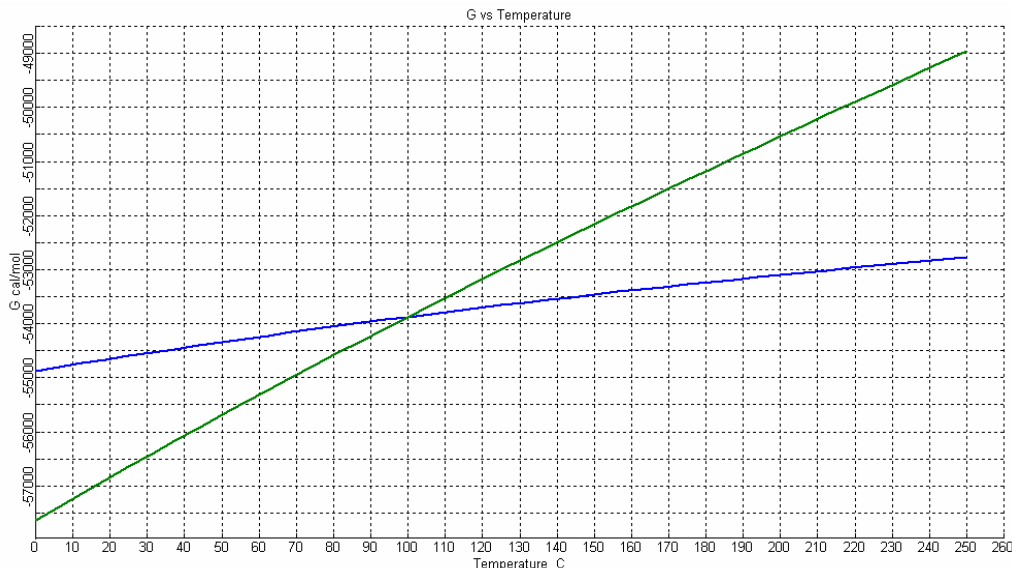


### ¡TENGA EN CUENTA!

Dentro de las propiedades termodinámicas que ofrece ASPEN PLUS® en la interfase de Properties Analysis no aparece el Potencial Químico expresado como  $\mu$ , en cambio ofrece la propiedad Energía Libre de Gibbs, G.

Sin embargo, si se estudia G para una sola sustancia en una fase determinada, este valor es equivalente al potencial químico de esta.

Al presionar G<sub>o</sub> se generan las siguientes gráficas de G vs. T y DG vs. T respectivamente:



### 4.2.3. Entalpía de vaporización

La *entalpía de vaporización* o calor de vaporización, es la cantidad de energía necesaria para que una mol de un componente en estado líquido que se encuentra en equilibrio con su vapor a una atmósfera, pase completamente a la fase de vapor. Se representa como  $\Delta H_{\text{vap}}$  y sus unidades en el sistema internacional son kJ/mol. (1)

Para el agua se tiene que:

$$\Delta H_{\text{vap}} = 540 \text{ cal/g}$$

### Pregunta de análisis 4.5

A partir del concepto de Entalpía de vaporización y mediante el uso del simulador de procesos, responda:

De los componentes de la Pregunta de análisis 4.1 ¿Cuál es el que más calor necesita para pasar a la fase vapor? ¿Por qué?

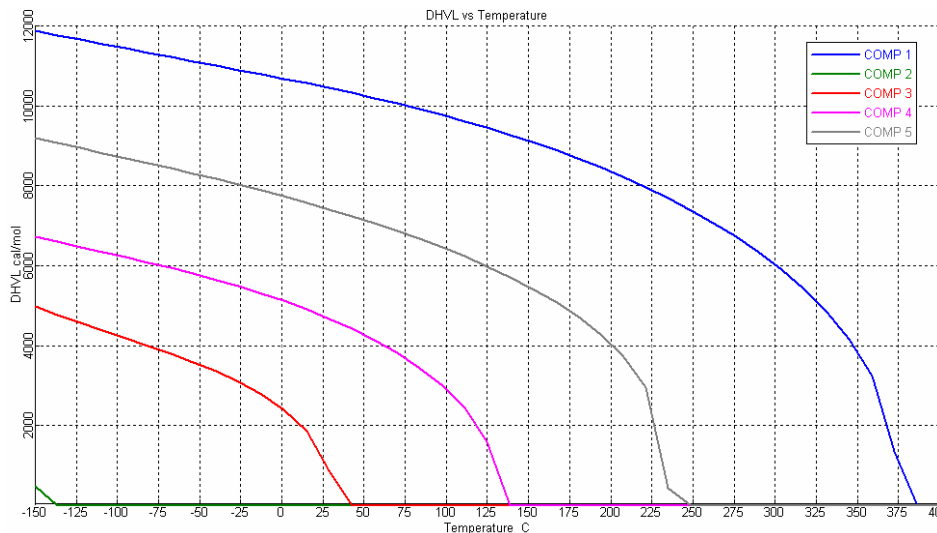
Para realizar este análisis siga los siguientes pasos en Aspen Plus:

Si aún no se encuentra en la interfase de *Property Analysis*, repita los pasos 1 a 9 de la sección 3.

Luego, en *Property* seleccione **DHVL** (Entalpía de vaporización para un componente puro).

Ingrese las unidades de la temperatura ( $^{\circ}\text{C}$ ), el rango:  $-150^{\circ}\text{C} < T < 400^{\circ}\text{C}$  y la presión: 1 atm. Seleccione los componentes que desea analizar.

Finalmente de click en "Go" para graficar DHVL (cal/mol) vs. Temperatura ( $^{\circ}\text{C}$ ).



### Pregunta de análisis 4.6

*Resuelva en Aspen Plus:*

- 1) ¿Por qué el vapor de agua saturada es muy apreciada como fluido de calentamiento?

---

---

- 2) ¿A qué temperatura en especial corresponden los puntos de inflexión que se muestran en la gráfica anterior?

---

Sugerencia: Busque en la literatura la temperatura de ebullición, de fusión y la temperatura crítica de cada uno de los compuestos dados. Compare el valor del punto de inflexión con los datos consultados y saque sus propias conclusiones.

Si desea consultar las temperaturas de referencia en el simulador, remítase a la sección 4.2.5 “Búsqueda de propiedades para componente puro”

- 3) ¿Cuál es la entalpía de evaporación a NBP (Normal Boiling Point) para cada componente?
- a. Nitrógeno: \_\_\_\_\_
  - b. Dióxido de Carbono: \_\_\_\_\_
  - c. Amoníaco: \_\_\_\_\_
  - d. Agua: \_\_\_\_\_
  - e. Acetona: \_\_\_\_\_

Para realizar este análisis, siga el procedimiento en Aspen Plus descrito en la Pregunta de análisis 4.5.

---



### SABÍAS QUE...

Gracias a la entalpía o calor de vaporización es que se lleva a cabo eficientemente la respiración y sudoración?

- Una de las ventajas del elevado calor de vaporización del agua es que permite a determinados organismos disminuir su temperatura corporal. Esta refrigeración se debe a que, para evaporarse, el agua de la piel (por ejemplo, el sudor) absorbe energía en forma de calor del cuerpo, lo que hace disminuir la temperatura superficial.
- El agua tiene el calor latente de vaporización más alto de todas las sustancias conocidas, esto ya que para romper los puentes de hidrógeno que enlazan las moléculas es necesario suministrar mucha energía, y es además el segundo más alto de fusión. Esta propiedad se utiliza también en la cocina, en refrigeración y en bombas de calor.

#### 4.2.4. Tensión superficial

El principal fenómeno de superficie y del cual se derivan todos los demás se denomina *Tensión Superficial*, la cual se puede definir como resistencia que presenta un líquido a la penetración de su superficie. Este es un fenómeno natural o espontáneo que presentan las sustancias cuando están en una región de interfase.

La tensión superficial se manifiesta por ciertos fenómenos que podemos observar a simple vista tal como:

- La forma esférica de las gotas de agua.
- Cuando una cuchilla de afeitar o un alfiler flota sobre la superficie del agua.
- Cuando los insectos se deslizan sobre la superficie del agua sin hundirse.
- El ascenso de un líquido a través de un capilar.
- Cuando se lanza una piedra con el ángulo apropiado sobre la superficie de un lago y ésta no se hunde.

En la Figura 5 se puede visualizar dos de los ejemplos explicados anteriormente.



Figura 5. Ejemplos de cómo la tensión superficial se manifiesta en la naturaleza

Para explicar el fenómeno de la tensión superficial consideremos un recipiente con agua expuesto al aire. Todas las moléculas que están en el interior de la superficie están rodeadas completamente por otras moléculas y son, por lo tanto, atraídas en todas las direcciones con la misma intensidad, por lo cual, tienen sus *fuerzas balanceadas*. Pero las que están sobre la superficie son atraídas exclusivamente por las moléculas situadas bajo ellas, lo que da lugar a una fuerza resultante que tiende a llevar las moléculas superficiales hacia el interior de la masa y como consecuencia a reducir la superficie, la cual se comporta como si estuviese confinada en el interior de una membrana elástica.

En el fenómeno de la tensión superficial intervienen dos tipos de fuerzas: una es la fuerza de *adhesión*, la cual se da entre partículas diferentes, por ejemplo, metal-líquido y la otra es la fuerza de *cohesión* que se da entre partículas iguales, por ejemplo, líquido-líquido.

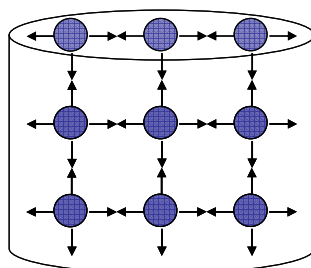


Figura 6. Fuerzas no compensadas sobre las moléculas superficiales de un líquido

La tensión superficial se puede definir como la fuerza por unidad de longitud que se debe ejercer sobre la superficie de un líquido para evitar la disminución de su área superficial y se expresa como:

$$\sigma = \frac{f}{2l} \quad (4.3)$$

Donde:

$\sigma$  = Tensión superficial

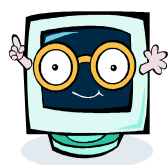
f = Fuerza

l = Longitud

Las unidades de tensión superficial son: dinas\*cm<sup>-1</sup> o Newton(N)\*m<sup>-1</sup>.

La tensión superficial en la mayoría de los líquidos disminuye al aumentar la temperatura, ya que las fuerzas de cohesión disminuyen al aumentar la agitación térmica. La influencia del medio exterior se debe a que las moléculas del medio ejercen acciones atractivas sobre las moléculas situadas en la superficie del líquido, contrarrestando las acciones de las moléculas del líquido. (5)

Dado que las fuerzas intermoleculares de atracción entre moléculas de agua se deben a los enlaces de hidrógeno y éstos representan una alta energía, la tensión superficial del agua es mayor que la de muchos otros líquidos. (6)



Para conocer más acerca de este interesante tema puede visitar la siguiente página web:

<http://citt.ufl.edu/Marcela/Sepulveda/html/tension.htm>

*Páginas web consultadas en junio de 2006*

A continuación se reforzará los conceptos estudiados anteriormente mediante el uso del simulador ASPEN PLUS®. Para esto, se plantean las siguientes preguntas de análisis diseñadas para los componentes introducidos al simulador en la pregunta de análisis 4.1.

#### Pregunta de análisis 4.7

*Encuentre:*

1) En el rango de Temperatura de 0 a 200°C. ¿Cómo explica el valor de la tensión superficial del nitrógeno (N<sub>2</sub>) que se muestra en la gráfica?

---

---

2) ¿Qué sucede con la tensión superficial en el punto crítico?

---

---

Sugerencia: Para responder esta pregunta de análisis, realice una gráfica tensión superficial vs. Temperatura, teniendo en cuenta a qué rango de temperatura debe trabajar si tiene la siguiente información:

Compuesto	Temperatura crítica (°C)
Agua	374.2
Acetona	235
Amoniaco	132.5
Dióxido de Carbono	31

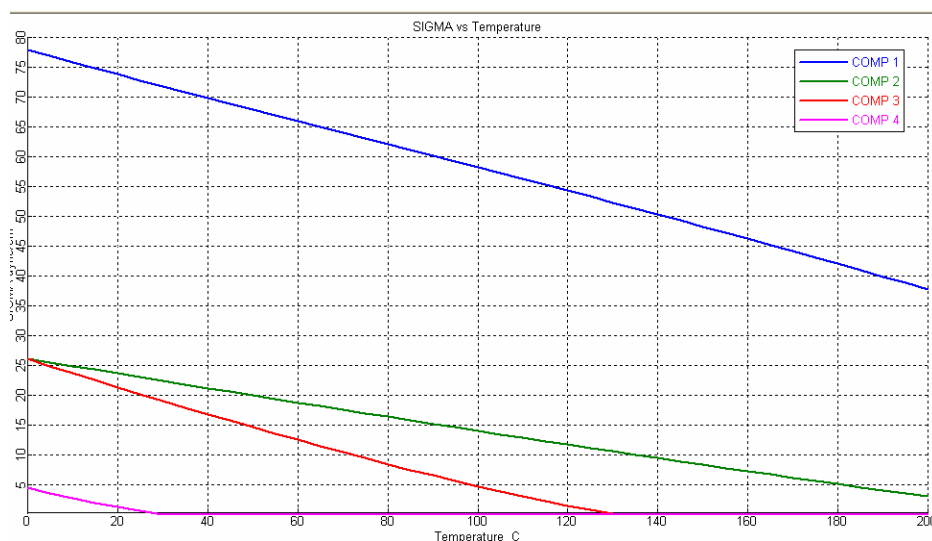
**Fuente:** The Properties of Gases and Liquids, 3rd Edition", by Reid, Prausnitz and Sherwood, McGraw Hill, 1977.

Para realizar este análisis siga los siguientes pasos en Aspen Plus:

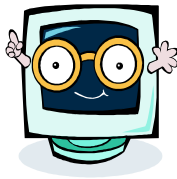
Si aún no se encuentra en la interfase de *Property Análisis*, repita los pasos 1 a 9 de la sección 3.

Luego, en *Property*→*Property Type* seleccione *Transport* (Propiedades de transporte o lo que en el currículo de Fisicoquímica se conoce como fenómenos de superficie). A continuación seleccione la propiedad SIGMA (Tensión superficial,  $\sigma$ ). Ingrese las unidades de la temperatura (°C), el rango: 0 °C<T<200 °C, la presión: 1 atm y seleccione los componentes a analizar.

Por último de click en "Go" para graficar  $\sigma$  (dinas/cm) vs. Temperatura (°C).







Si desea conocer cómo ASPEN PLUS ® realiza los cálculos de tensión superficial y otros cálculos siga la siguiente ruta:

En la barra de menú vaya a *help* y seleccione *help topics*, luego busque la pestaña *Search* y escriba el nombre del tema que esté buscando, en este caso escriba *Surface* y señale en el cuadro de abajo *Surface Tension*. En la ventana contigua se explica el modelo utilizado para calcular la Tensión superficial.

Esta ayuda es de gran utilidad ya que explica qué métodos utiliza el simulador para realizar los cálculos y de este modo, el usuario no vea el simulador como “caja negra” en la que no se sabe qué ecuaciones utilizó.

The screenshot shows the 'APrSystem Help' window. The search bar contains 'surface', and the results list includes 'surface', 'Surface', and 'SURFACE-TENSION'. The selected result is 'SURFACE-TENSION', which leads to a page titled 'Hakim-Steinberg-Stiel/DIPPR/PPDS/IK-CAPE Liquid Surface Tension'. The page explains that the Aspen Physical Property System uses parameter TRNSWT/5 to determine which submodel is used. A table lists the submodels and their corresponding equations and parameters:

TRNSWT/5	This equation is used	And this parameter is used
0	Hakim-Steinberg-Stiel	—
106	DIPPR	SIGDIP
301	PPDS	SIGPDS
401	IK-CAPE polynomial equation	SIGPO

The page also includes the equation for the Hakim-Steinberg-Stiel model:

$$\sigma_i^{*j} = 4.60104 \times 10^{-7} p_a^{0.2} T_a^{0.4} Q_{\sigma} \left( \frac{1 - T_{ri}}{0.4} \right)^m$$

Where:

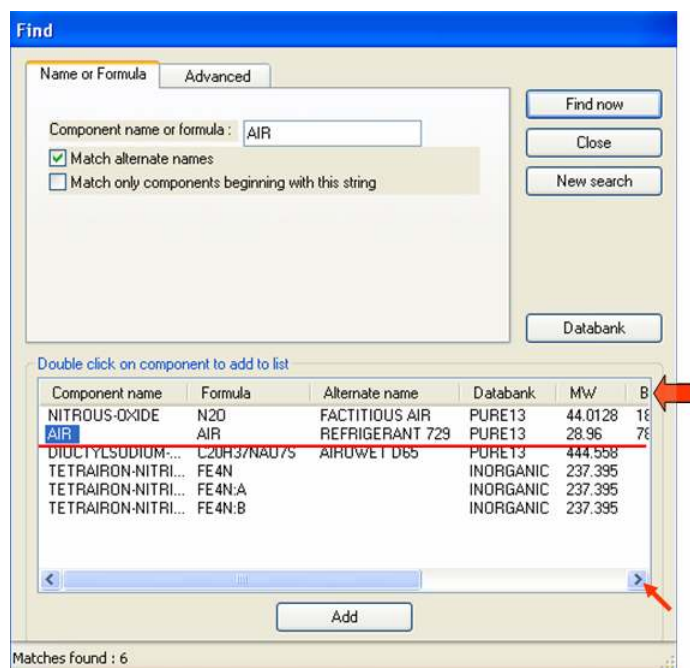
## 4.2.5. Búsqueda de propiedades para componente puro

Aspen Plus dispone de una amplia base de datos termodinámicos (*Databanks*) a partir del cual el simulador realiza los cálculos internamente cuando se corre una simulación. Esta base de datos resulta muy útil para consultar ciertas propiedades para varios componentes. A continuación se explica cómo hacer uso de esta herramienta.

### 4.2.5.1. Búsqueda básica

Una forma de comprobar fácilmente algunos datos básicos para varias sustancias como peso molecular o punto de ebullición es la siguiente:

Diríjase a la carpeta *Components* ubicada en el *Data Browser*, haga click en *Find*, escriba el nombre del componente y oprima *Find now* o simplemente "Enter".

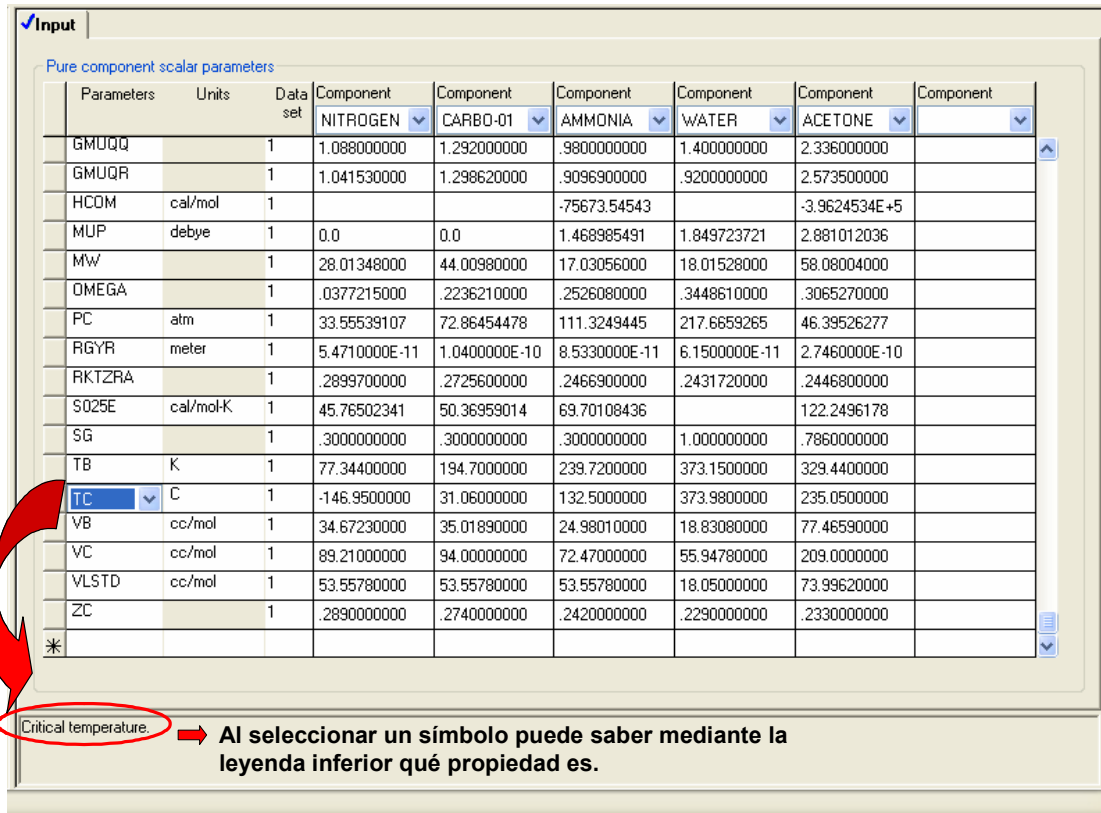


Si observa los datos junto al nombre del componente mediante la barra de desplazamiento, encontrará que para cada uno figura la fórmula, el nombre alternativo, el peso molecular (MW), el punto de ebullición normal (BP), el número de CAS<sup>4</sup> y la clase de componente.

<sup>4</sup> El número registrado CAS, Chemical Abstracts Service, es una identificación numérica única que asigna la Sociedad Química Americana para compuestos químicos, polímeros, secuencias biológicas, preparados y aleaciones que han sido descritos en la literatura. Definición adaptada de Wikipedia. La Enciclopedia Libre. <http://es.wikipedia.org>.

#### 4.2.5.2. Búsqueda alterna de propiedades

Otra forma de comprobar ciertos valores para varios componentes es la siguiente: Cierre primero las ventanas del *Properties Analysis* y diríjase al *Data Browser*, haga click en *Components*, y luego en el botón inferior derecho "*Review*" para abrir la ventana que se muestra a continuación:



Parameters	Units	Data set	Component	Component	Component	Component	Component	Component
			NITROGEN	CARBO-01	AMMONIA	WATER	ACETONE	
GMUQQ		1	1.088000000	1.292000000	.9800000000	1.400000000	2.336000000	
GMUQR		1	1.041530000	1.298620000	.9096900000	.9200000000	2.573500000	
HCOM	cal/mol	1			-75673.54543		-3.9624534E+5	
MUP	debye	1	0.0	0.0	1.468985491	1.849723721	2.881012036	
Mw		1	28.01348000	44.00980000	17.03056000	18.01528000	58.08004000	
OMEGA		1	.0377215000	.2236210000	.2526080000	.3448610000	.3065270000	
PC	atm	1	33.55539107	72.86454478	111.3249445	217.6659265	46.39526277	
RGYR	meter	1	5.4710000E-11	1.0400000E-10	8.5330000E-11	6.1500000E-11	2.7460000E-10	
RKTZRA		1	.2899700000	.2725600000	.2466900000	.2431720000	.2446800000	
S025E	cal/mol-K	1	45.76502341	50.36959014	69.70108436		122.2496178	
SG		1	.3000000000	.3000000000	.3000000000	1.000000000	.7860000000	
TB	K	1	77.34400000	194.7000000	239.7200000	373.1500000	329.4400000	
TC	C	1	-146.9500000	31.06000000	132.5000000	373.9800000	235.0500000	
VB	cc/mol	1	34.67230000	35.01890000	24.98010000	18.83080000	77.46590000	
VC	cc/mol	1	89.21000000	94.00000000	72.47000000	55.94780000	209.0000000	
VLSTD	cc/mol	1	53.55780000	53.55780000	53.55780000	18.05000000	73.99620000	
ZC		1	.2890000000	.2740000000	.2420000000	.2290000000	.2330000000	
*								

Critical temperature. → Al seleccionar un símbolo puede saber mediante la leyenda inferior qué propiedad es.

En esta ventana encontrará varias propiedades de su interés tales como:

- ✓ Peso molecular (MW)
- ✓ Densidad (RHOM)
- ✓ Temperatura de ebullición normal (TB)
- ✓ Temperatura de fusión (TFP)
- ✓ Temperatura crítica (TC)
- ✓ Presión Crítica (PC)
- ✓ Entalpía de vaporización (DHVLB)

Entre otros datos y factores termodinámicos.

### 4.3. EJERCICIOS PROPUESTOS

Construya en Aspen Plus la gráfica que considere adecuada para responder las siguientes preguntas:

- 1) Intente resolver las preguntas 1 a 6 abordadas en la sección 4.2 para otros componentes. (Ver ANEXO 2)
- 2) Por medio de una gráfica de Presión de vapor vs. Temperatura generada en Aspen Plus, explique la solución a las siguientes preguntas:
  - a. ¿Por encima de qué presión se encuentra el dióxido de carbono inyectado a una botella de gaseosa que se encuentra almacenada a 25 °C?
  - b. El dióxido de carbono es utilizado para efectos de humo y niebla en obras de teatro y discotecas. ¿Por encima de qué temperatura se encuentra este componente si la presión atmosférica es de 640 mm Hg?
- 3) ¿Por qué el amoníaco es comúnmente utilizado como refrigerante?
- 4) A cuánto herviría el agua en:
  - a) Una olla de presión común que tiene una presión máxima de operación de 1.4 bar (1.382 atm).
  - b) La cima del monte Everest en la cual la presión es de 0.3 bar (0.296 atm).
- 5) Resuelva la Pregunta de análisis 4.4 para los siguientes componentes:
  - a) Acetona
  - b) Amoníaco
  - c) Etanol
  - d) Benceno
- 6) El valor de la tensión superficial depende como ya se había dicho de las fuerzas intermoleculares en el seno del líquido. Así, cuanto mayor sean las fuerzas de cohesión del líquido mayor será su tensión superficial. Grafique en ASPEN PLUS tensión superficial vs. temperatura para el hexano, el agua y el mercurio. De los compuestos graficados, explique específicamente por qué unos tienen mayor o menor tensión superficial que otros. (Clave: piense en el tipo de enlaces y fuerzas moleculares que cada uno de los tres compuestos tiene).

#### 4.4. BIBLIOGRAFÍA Y CIBERGRAFÍA

1. "Wikipedia". La enciclopedia libre

<http://es.wikipedia.org>

Fecha de consulta: Junio de 2006

2. Fundamentos de termodinámica

<http://joule.qfa.uam.es/beta-2.0/temario/tema3/tema3.php>

Fecha de consulta: Junio de 2006

3. Potencial químico y cambio de fases.

<http://cuhwww.upr.clu.edu/~inieves/potencial-quim.htm>

Fecha de consulta: Julio de 2006

4. Transformaciones físicas para sustancias puras

[ufq.unq.edu.ar/Docencia-Virtual/Fisicoquimica-Virtual/Equilibrio/DOCs/equilibrio2.doc](http://ufq.unq.edu.ar/Docencia-Virtual/Fisicoquimica-Virtual/Equilibrio/DOCs/equilibrio2.doc)

Fecha de consulta: Octubre de 2006

5. Notas de clase y documentación entregados en la materia de Fisicoquímica 2002-1.

6. Tensión superficial.

<http://citt.ufl.edu/Marcela/Sepulveda/html/tension.htm>

Fecha de consulta: Julio de 2006

## 5. SISTEMAS DE DOS COMPONENTES

### 5.1. OBJETIVO ESPECÍFICO

- Aprender a realizar diagramas binarios en ASPEN PLUS® para comprender el comportamiento de estas mezclas, así como visualizar sus azeótropos.

### 5.2. ALGUNOS CONCEPTOS FUNDAMENTALES Y SU APLICACIÓN EN ASPEN

A continuación se desarrolla la guía práctica para la construcción de diagramas de fase para sistemas binarios y su análisis, mediante el uso del simulador ASPEN PLUS®

#### 5.2.1. Sistema en equilibrio

Cuando se dice que un sistema se encuentra en equilibrio, nos referimos al estado en el cual no se registran cambios en sus propiedades físicas o químicas con el transcurso del tiempo. Un sistema físico conformado por una o varias sustancias que no reaccionan entre sí, presentes en diferentes fases, puede alcanzar un estado de equilibrio, en el que la cantidad (peso o moles) de cada fase permanece constante en el tiempo. (1)

#### 5.2.2. Regla de las fases de Gibbs

La regla de las fases de Gibbs nos indica el número de variables independientes que se deben especificar para describir la condición de un sistema aislado. A continuación se enumeran las suposiciones a tener en cuenta:

Primero supondremos que el sistema se encuentra en equilibrio, entonces la temperatura del sistema y la presión del sistema es igual para todos los componentes.

$$T_{\text{comp},1} = T_{\text{comp},2} = T_{\text{comp},3} = \dots = T_{\text{sist}} \quad (5.1)$$

$$P_{\text{comp},1} = P_{\text{comp},2} = P_{\text{comp},3} = \dots = P_{\text{sist}} \quad (5.2)$$

Las temperaturas y presiones que experimentan todas las fases son las mismas:

$$T_{\text{fase},1} = T_{\text{fase},2} = \dots \quad (5.3)$$

$$P_{\text{fase},1} = P_{\text{fase},2} = \dots \quad (5.4)$$

Lo expresado en las ecuaciones (5.3) y (5.4) no significa que las presiones parciales de los componentes individuales del gas sean las mismas. Significa que cada componente del sistema, incluso los componentes gaseosos, se encuentran sujetos a la misma presión del sistema.

Otra suposición importante a tener en cuenta es que el sistema es isocórico<sup>1</sup> y que se conoce la cantidad de materia con que se está trabajando.

Una vez entendido lo anterior, podemos responder la siguiente pregunta *¿Cuántos grados de libertad se deben especificar para conocer el estado de un sistema en equilibrio?*

Si tenemos **C** componentes y **P** número de fases. Para describir las cantidades relativas (como las fracciones molares) de los componentes, se debe especificar **C - 1** (la fracción de un componente se puede determinar restando). Ya que la fase de cada componente debe especificarse tenemos **(C - 1) \* P** valores. Por último es necesario especificar la temperatura y la presión, así tenemos un total de **(C - 1) \* P + 2** valores que necesitamos especificar para describir nuestro sistema.

Sin embargo, si el sistema se encuentra en equilibrio, los potenciales químicos de las diferentes fases de cada componente deben ser iguales. Es decir:

$$\mu_{1,\text{sol}} = \mu_{1,\text{liq}} = \mu_{1,\text{gas}} = \dots = \mu_{1,\text{otra fase}} \quad (5.5)$$

Esta expresión debe cumplirse para cada componente. Esto significa que podemos eliminar **P - 1** valores para cada componente **C**, para tener un total de **(P - 1) \* C** valores. La cantidad de valores que quedan representan los grados de libertad:

$$F = (C - 1) * P + 2 * (P - 1) * C \quad (5.6)$$

$$F = C - P + 2 \quad (5.7)$$

La ecuación (5.7) es la conocida **Regla de Fases de Gibbs** (2).



Resumiendo tenemos que los grados de libertad **F** (el número de valores que se deben especificar para definir el sistema) está dado por la ecuación (5.7), donde:

**C** = Número de componentes que conforman el sistema

**P** = Número de fases presentes en el sistema.

Esta es una de las reglas más importantes y de uso más común, recuerda aplicarla cada vez que te enfrentes a solucionar un problema.

<sup>1</sup> **Sistema Isocórico:** Sistema en el cual el volumen se mantiene constante.

### Pregunta de análisis 5.1

*Responda*

Para un sistema en equilibrio de Oxígeno – Nitrógeno. ¿Cuántos grados de libertad se necesitan para especificar el sistema? Tenga en cuenta que a temperatura ambiente el oxígeno y el nitrógeno se encuentran en fase gaseosa. (Utilice la ecuación 5.7)

F= \_\_\_\_\_

¿Cuáles son los grados de libertad que deben especificarse?

---

---

---



Los grados de libertad son muy importantes cuando se está trabajando con simuladores de proceso, porque para que el software realice los cálculos se deben definir todos los grados de libertad para especificar el sistema.

---

### 5.2.3. Diagramas de Fase para Sistemas Binarios

Para sistemas binarios, los diagramas de fases muestran en qué fase se encontrarán las diferentes sustancias según su concentración y la temperatura del sistema a presión constante, o según composición y la presión del sistema a temperatura constante. (1)

#### 5.2.3.1. Diagrama P-x

En la Figura 7 se muestra el diagrama a temperatura constante, la región líquida está en la parte superior del diagrama, puesto que a altas presiones la fase líquida es estable. La curva superior describe la composición del líquido, y la inferior la del vapor.



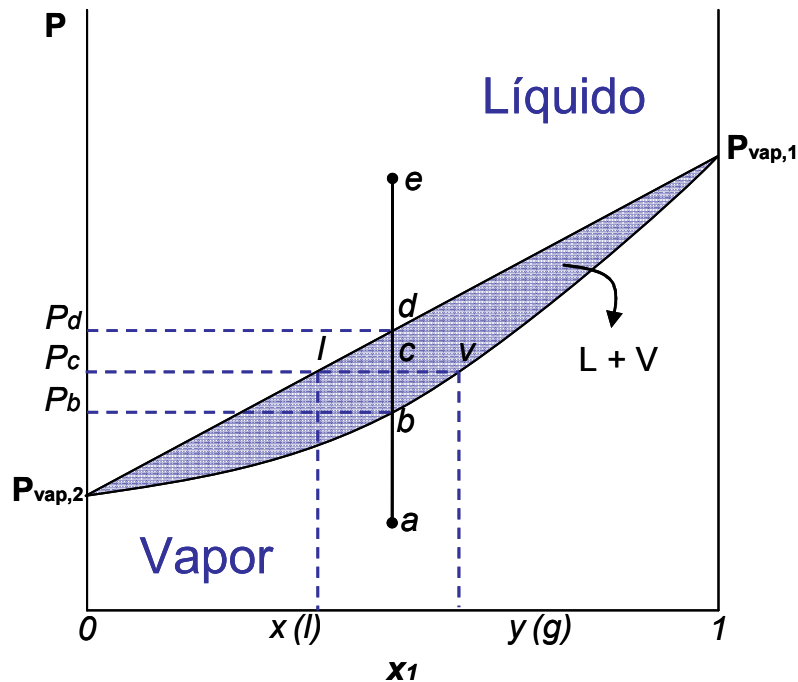


Figura 7. Diagrama P-x. Cambio isotérmico de la presión, con comportamiento ideal

Los puntos en la región coloreada describen estados en los cuales coexisten en equilibrio líquido y vapor. La línea de unión ( $l - v$ ) en la región líquido-vapor comunica la composición del vapor y la del líquido que coexisten a esa presión determinada.

En el punto **e** el sistema es completamente líquido y permanece así hasta que, al reducirse la presión, alcanza el punto **d**. En este punto aparece la primera señal de vapor, tenga en cuenta que en éste punto la composición del vapor es mucho más rica en el componente 1 que el líquido, esto se da por que el componente 1 es más volátil. Al disminuir más la presión, encontramos el punto **c**, aquí el líquido tiene una composición de  $x$  y el vapor de  $y$ . Una mayor reducción de la presión desplaza el estado al punto **b**, donde desaparece el último vestigio de líquido. En el punto **a**, el sistema es todo vapor. (3)

El sistema descrito es para una solución ideal que se comporta según la ley de Raoult. Si las desviaciones del comportamiento ideal no son muy grandes, la figura será casi la misma, excepto que la curva de composición del líquido no es una línea recta. La interpretación es la misma que la empleada para la solución ideal. En la Figura 8 el mismo diagrama P-x, con los mismos puntos, pero con un comportamiento real.

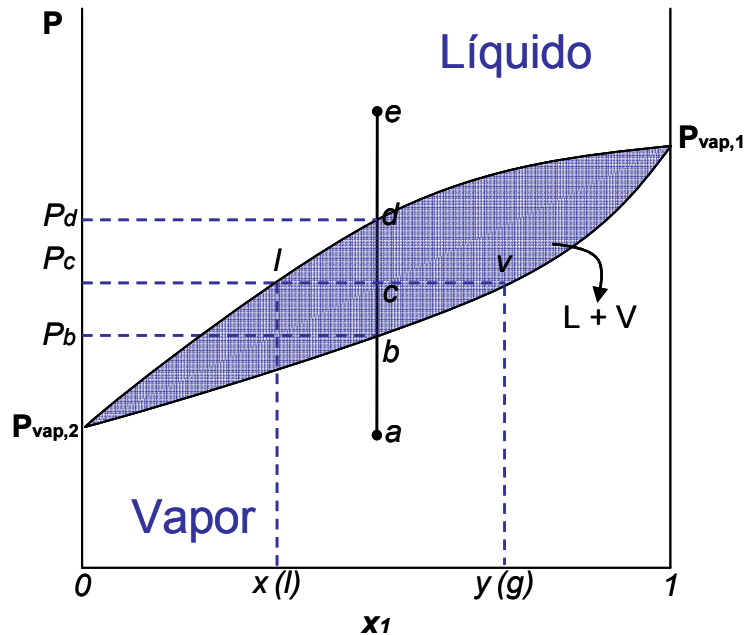


Figura 8. Diagrama P-x. Cambio isotérmico de la presión, con comportamiento real

### 5.2.3.2. Diagrama T-x

Los principios aplicados al diagrama P-x pueden aplicarse de forma muy similar al diagrama T-x.

En la **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.** se muestra el diagrama a una presión constante y las temperaturas de ebullición en función de las composiciones para una solución binaria. Ni la curva de líquido ni la de vapor son líneas rectas.

El componente 1 tiene la Presión de vapor más alta y por lo tanto, su temperatura de ebullición es menor.

La región líquida está en la parte inferior del diagrama, ya que a una presión constante, el líquido es estable a bajas temperaturas. La curva inferior describe la composición del líquido, y la superior la del vapor.

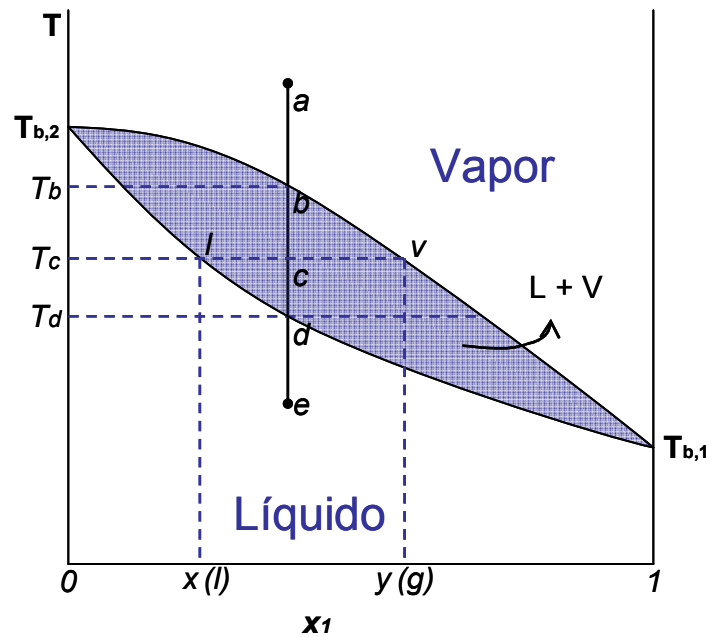


Figura 9 Diagrama T-x. Cambio isobárico de la Temperatura

Los puntos en la región superior del diagrama son estados gaseosos, y los de la parte inferior son estados líquidos. Los puntos en la región media describen estados en los cuales coexisten en equilibrio líquido vapor. La línea de unión ( $l - v$ ) en la región líquido-vapor comunica la composición del vapor y la del líquido que coexisten a esa temperatura.

En el punto **e** el sistema es completamente líquido; al subir la temperatura, el sistema permanece totalmente líquido hasta alcanzar el punto **d**. A  $T_d$  aparece la primera señal de vapor con la composición **y**. El vapor es mucho más rico que el líquido en componente 1, el de más baja temperatura de ebullición. Este hecho constituye la base para la separación de mezclas volátiles por destilación. Conforme la temperatura aumenta, el estado se desplaza al punto **c**, el número relativo de moles de líquido y vapor presentes está dado por la relación  $(c - v) / (c - l)$ . Si la temperatura aumenta aún más, en el punto **b** desaparece el último vestigio de líquido de composición **x**. En el punto **a**, el sistema es todo vapor. (4)



Es fácil confundir las regiones de líquido y vapor cuando se está estudiando ya sea diagramas T-x o P-x. Para distinguir las regiones de líquido y vapor sólo se debe tener un poco de sentido común, el líquido es estable a bajas temperaturas, parte inferior del diagrama T-x, y a altas presiones, parte superior del diagrama P-x.

### Pregunta de análisis 5.2

*Responda las siguientes preguntas:*

Para la mezcla Oxígeno – Nitrógeno a 1 atmósfera de presión construya el diagrama T-x. Utilice como método termodinámico NRTL. (Ver ANEXO 1 para conocer más acerca de los modelos termodinámicos)

1) La composición de cada fase a 80 K y a 88 K.

---

2) A qué temperatura la fase vapor es 79% de N<sub>2</sub> y 21% de O<sub>2</sub>

---

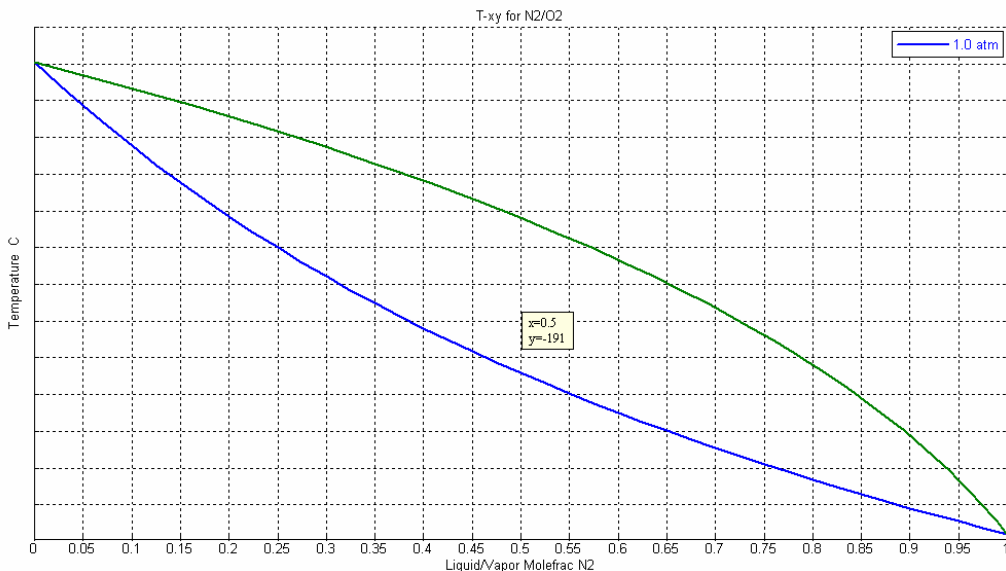
3) A qué temperatura la fase líquida es 30% de N<sub>2</sub> y 70% de O<sub>2</sub>

---

Para responder las preguntas anteriores siga el siguiente procedimiento en ASPEN PLUS:

De la sección 3.3, por favor realice los pasos 10 a 14. Cuando ya se encuentre en la ventana de *Binary Analysis*, para realizar el diagrama binario Temperatura vs. Composición seleccione en *Analysis Type: T xy*.

En esta ventana usted puede escoger si los resultados se generan en base molar o másica y a qué presión desea realizar el análisis. Para este caso trabaje a 1 atm y en base molar. Finalmente, para generar el diagrama de click en Go. A continuación ASPEN realiza los cálculos para el diagrama T-x. Al hacer click dentro de la gráfica, el cursor muestra las coordenadas.



**Sugerencia:** Además de la gráfica, se puede ver la tabla con los resultados numéricos. Para observar estos resultados, diríjase a las pestañas en la parte inferior de la ventana donde encontrará las diferentes ventanas en las que ha

trabajado. Haga click en la pestaña Binary Analysis Results que contiene la tabla de resultados.

PRES	MOLEFRAC N2	TOTAL TEMP	TOTAL KVL O2	TOTAL KVL N2	LIQUID GAMMA O2
atm	0	-182,945	1,000066	3,618543	1
1	0.025	-183,5568	0,9376644	3,433548	1
1	0.05	-184,1401	0,8810126	3,263711	1
1	0.075	-184,6998	0,829191	3,106651	1
1	0.1	-185,2337	0,7819924	2,962074	1
1	0.125	-185,7448	0,7388011	2,828398	1
1	0.15	-186,2343	0,6991937	2,704575	1
1	0.175	-186,7037	0,662798	2,589673	1
1	0.2	-187,1541	0,6292864	2,482861	1
1	0.225	-187,5865	0,5983696	2,3834	1
1	0.25	-188,0022	0,5697924	2,290629	1
1	0.275	-188,402	0,5433286	2,203958	1
1	0.3	-188,7868	0,5187778	2,046855	1
1	0.325	-189,1575	0,4959619	1,975522	1
1	0.35	-189,5149	0,4747224	1,908476	1
1	0.375	-189,8597	0,4549181	1,845372	1



Tenga siempre presente que los diagramas generados por ASPEN, presentan un comportamiento real, por tanto en el diagrama P-x la línea del líquido siempre, aparecerá curva.

En las siguientes figuras se muestran ejemplos de los diferentes diagramas binarios líquido-vapor que podemos encontrar. La Figura 10a es una mezcla simple e ideal igual al ejercicio que acabamos de realizar, la Figura 10b es una mezcla azeotrópica de punto de ebullición máximo y la Figura 10c es una mezcla azeotrópica de punto de ebullición mínimo.

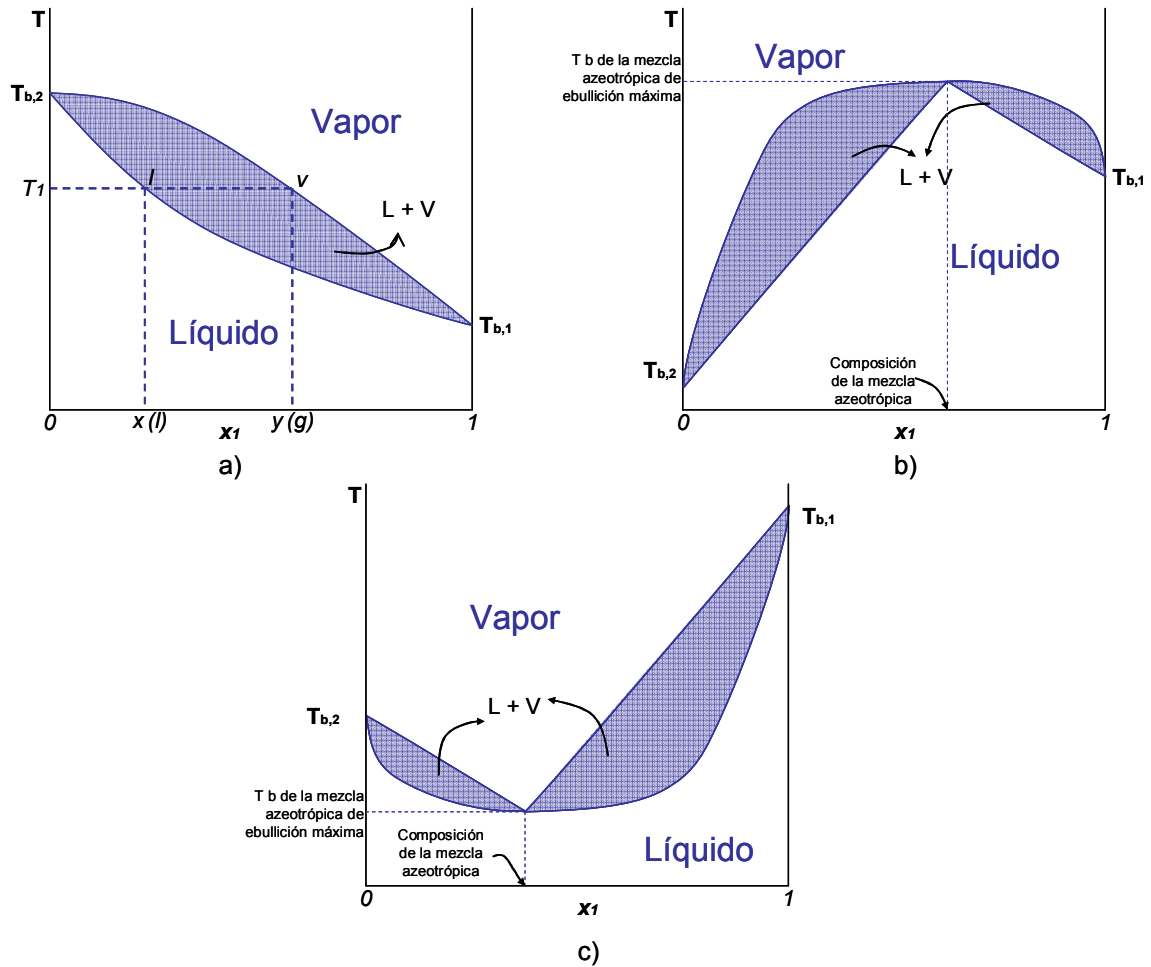


Figura 10. Diagramas binarios Líquido – Vapor

### 5.2.3.3. Mezclas Azeotrópicas

Las *mezclas azeotrópicas* (del griego hervir sin cambio) presentan una característica especial: a cierta composición, llamada composición azeotrópica, ebulLEN a temperatura constante (°T azeotrópica), de manera que tanto la fase líquida como la fase vapor presentan la misma composición durante todo el proceso, comportándose la mezcla como si fuera una sustancia pura. (1)

Si se construye un diagrama P-x para una mezcla azeotrópica se observa un comportamiento similar, donde a cierta composición tanto la fase líquida y la gaseosa ebulLEN a una presión constante.

### Pregunta de análisis 5.3

#### Responda

Para el sistema Etanol-Benceno a temperatura ambiente (25°C) responda las siguientes preguntas.

1) ¿Cuál es la presión de vapor del benceno?

---

2) ¿Cuál es la presión de vapor del etanol?

---

3) ¿Cuál es el % en peso del azeótropo a temperatura ambiente?

---

Sugerencia: Construya el diagrama P-x. Recuerde que en la ventana donde está especificando las condiciones del sistema, en *Analysis Type* escoja la opción *Pxy*.

---

Un azeótropo, puede hervir a una temperatura superior, intermedia o inferior a la de los constituyentes de la mezcla, permaneciendo el líquido con la misma composición inicial, al igual que el vapor, por lo que no es posible separarlos por destilación simple.

### Pregunta de análisis 5.4

#### Selección múltiple

Si se quiere obtener metanol puro mediante la destilación fraccionada de una solución de  $\text{CCL}_4$ - $\text{CH}_3\text{OH}$ . ¿Cuánto debe contener la solución inicial?

Sugerencia: Para escoger la respuesta correcta construya en ASPEN el diagrama T-x para el sistema que se desea destilar a 1 atmósfera de presión y utilizando como paquete termodinámico Wilson.

- a) más de 79.44% peso de  $\text{CCL}_4$
- b) menos de 79.44% peso de  $\text{CCL}_4$
- c) Exactamente 79.44% peso de  $\text{CCL}_4$



Justifique su respuesta:

---

---

---

---

El azeótropo que hierve a una temperatura máxima se llama *azeótropo de ebullición máxima* y el que lo hace a una temperatura mínima se llama *azeótropo de ebullición mínima*. Ambos tipos de azeótropos presentan una característica común, que la composición de la fase líquida y vapor en equilibrio líquido-vapor es idéntica en el punto donde se forma el azeótropo. Los sistemas azeotrópicos de ebullición mínima son mas frecuentes que los de ebullición máxima. (5)

#### Pregunta de análisis 5.5

---

*Responda*

¿Qué uso industrial puede tener un azeótropo de ebullición mínima?

---

---

---

---

Sugerencia: Construya en el simulador el diagrama T-x para el sistema descrito en la pregunta 5.4. Con el diagrama anote la temperatura de ebullición de cada componente y del azeótropo. Analice los beneficios puede traer una mezcla que tenga un punto de ebullición menor que los compuestos que la componen.

---

### 5.3. EJERCICIOS PROPUESTOS

- 1) Construya los diagramas T-x utilizando ASPEN PLUS® para cada uno de los sistemas dados y complete la información de la Tabla 1 y la
- 2) Tabla 2.  
(Ver **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.** para conocer más acerca de los métodos termodinámicos).

**Tabla 1. Azeótropos con punto de ebullición mínimo a 1 atm de presión**

Comp 1	Tb (°C)	Comp 2	Tb (°C)	Azeótropo % peso de 1	Tb (°C)	Modelo Termodinámico
Agua (H <sub>2</sub> O)	100	Etanol (C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O)	78,3			Wilson
Tetracloruro de carbono (CCl <sub>4</sub> )	76,64	Metanol (CH <sub>4</sub> O)	64,7			Wilson
Disulfuro de carbono (CS <sub>2</sub> )	46,25	Acetona (C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O)	56,15			Wilson
Cloroformo (CHCl <sub>3</sub> )	61,2	Metanol (CH <sub>4</sub> O)	64,7			Wilson
Agua (H <sub>2</sub> O)	100	Isopropanol (C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> O)	82,5			Wilson
Disulfuro de carbono (CS <sub>2</sub> )	46,25	Yodometano (CH <sub>3</sub> I)	42,55			Wilson
Etanol (C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O)	78,3	Benceno (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> )	80,1			Wilson

**Tabla 2. Azeótropos con punto de ebullición máximo a 1 atm de presión**

Comp 1	Tb (°C)	Comp 2	Tb (°C)	Azeótropo % peso de 1	Tb (°C)	Modelo Termodinámico
Cloroformo (CHCl <sub>3</sub> )	61,2	Acetona (C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O)	56,15			Wilson
Fenol (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> O)	182,2	Anilina (C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> N)	184,35			Unifac
Cloroformo (CHCl <sub>3</sub> )	61,2	Acetato de metilo (C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub> )	57			Wilson

- 3) Para el sistema ACETONA-CLOROFORMO realice el diagrama en equilibrio a 1, 2 y 3 atm.

Para realizar el diagrama a varias presiones tenga en cuenta el siguiente procedimiento:

- De la sección 3.3 realice los pasos 10 A 14
- En la ventana de Binary Analysis, escoja:  
Analysis type: Txy  
Basis: mass fraction  
Overall range: Lower: 1, Upper: 3, Increments: 1
- Click en Go

The screenshot shows the Aspen Plus Binary Analysis window. The 'Analysis type' is set to 'Txy'. The 'Components' section shows 'Component 1: ACETONE' and 'Component 2: CHLOR-01'. The 'Compositions' section shows 'Basis: Mass fraction' and 'Component: ACETONE'. The 'Valid phases' section is set to 'Vapor-Liquid'. The 'Pressure' section shows 'Units: atm' and 'Overall range' selected with 'Lower: 1', 'Upper: 3', and 'Increments: 1'. The 'Property options' section shows 'Property method: WILSON', 'Henry components: ', 'Chemistry ID: ', and 'Simulation approach: True species'. The 'Go' button is highlighted with a red arrow.

De los resultados obtenidos responda las siguientes preguntas:

- Explique el comportamiento de los diagramas a las diferentes presiones.
- ¿A qué % de peso se desplaza el azeótropo para el componente 1? (Explore la ventana de *binary analysis results*, donde se encuentra reportados los resultados tabulados o trate con “Zoom” de visualizar el azeótropo. Para esto, acuda al ANEXO 2.

- ¿Como ingeniero de procesos qué beneficios encuentra en aumentar la presión de mezclas con azeótropo?
- 4) En el laboratorio el uso de la cristalería para cada práctica es alto. El proceso de limpieza consiste en lavarlas, enjuagarlas y sacarlas al ambiente. Se desea minimizar el tiempo de secado, un ingeniero de procesos propone enjuagar las piezas con una solución Agua-Acetona. ¿Por qué se puede utilizar esta solución?

Sugerencia:

Tenga en cuenta los puntos de ebullición del agua y de la acetona, así como la temperatura del azeótropo que forma esta mezcla.

Realice el diagrama de equilibrio líquido – vapor en ASPEN para que pueda visualizar los valores más fácilmente.

#### 5.4. BIBLIOGRAFÍA Y CIBERGRAFÍA

---

1. GARCÉS, B; SIERRA, G. (2002). Manual de prácticas de laboratorio de fisicoquímica. Medellín: Universidad EAFIT. Departamento de ingeniería de procesos.

2. BALL, D. Fisicoquímica.(2004) México: Ed. Thomson Ierning.

3. CASTELLAN, G. (1983). Fisicoquímica. 2 ed. Colombia: Addison-wesley iberoamericana.

4. CASTELLAN, G. (1983). Fisicoquímica. 2 ed. Colombia: Addison-wesley iberoamericana.

5. Wikipedia. La enciclopedia libre

<http://es.wikipedia.org/wiki/Aze%C3%B3tropo>

Fecha de consulta: Junio de 2006

## ANEXO 1. MODELOS TERMODINÁMICOS UTILIZADOS EN ESTA GUÍA

El paquete termodinámico es un conjunto de ecuaciones y modelos que le permite al simulador calcular diferentes propiedades de un sistema. Cada método termodinámico está diseñado para ciertos tipos de sistemas, componentes y condiciones, por tanto es importante conocer cuáles son los criterios de escogencia de cada uno de ellos, porque de esta decisión depende la confiabilidad de los datos que el simulador calcula.

En esta guía no se entrará en el detalle del manejo de las ecuaciones de cada modelo, sólo en los criterios de selección.

En la Tabla 3 se encuentra un listado de las características más importantes de los modelos termodinámicos aquí utilizados.

Tabla 3. Características más importantes de los modelos termodinámicos<sup>1</sup>

CARACTERÍSTICA	MODELO TERMODINÁMICO			
	NRTL	WILSON	UNIQUAC	UNIFAC
Modelo de coeficientes de actividad	X	X	X	X
Utiliza la ley de los gases ideales para modelar la fase vapor.	X	X	X	
Se debe trabajar a bajas presiones (menores de 10 bar)	X	X	X	
Rango de temperatura entre 20 y 150°C				X
Predice el equilibrio líquido-vapor	X	X	X	X
Predice el equilibrio líquido-líquido	X		X	X
Predice el comportamiento de soluciones líquidas no ideales	X	X	X	X
Se puede trabajar con componentes polares y no polares	X	X	X	X
No se puede trabajar con compuestos cerca de su temperatura crítica	X	X	X	X

Para profundizar en este tema se sugiere leer las ayudas al usuario que ASPEN PLUS® posee y libros de Termodinámica.

<sup>1</sup> Descripción adaptada de la ayuda al usuario proporcionada por ASPEN PLUS ®



ASPEN PLUS® posee una ayuda muy buena para guiarte en la escogencia de los modelos termodinámicos según los componentes y sistema químico que posea.


Busca en la ventana donde se elige el modelo termodinámico este símbolo



y sigue las instrucciones que ASPEN indique.

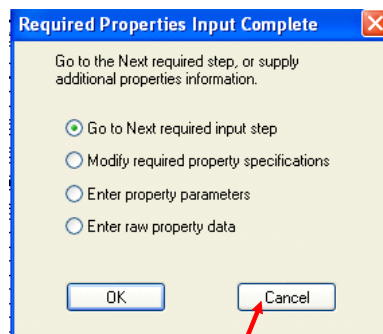
## ANEXO 2. ¿CÓMO ADICIONAR O ELIMINAR COMPONENTES?

### Agregar componentes

Si desea agregar más componentes, solo debe dar click en la primera pestaña inferior (o en ) que lo lleva de nuevo al Data Browser en donde por Components puede adicionarlos.

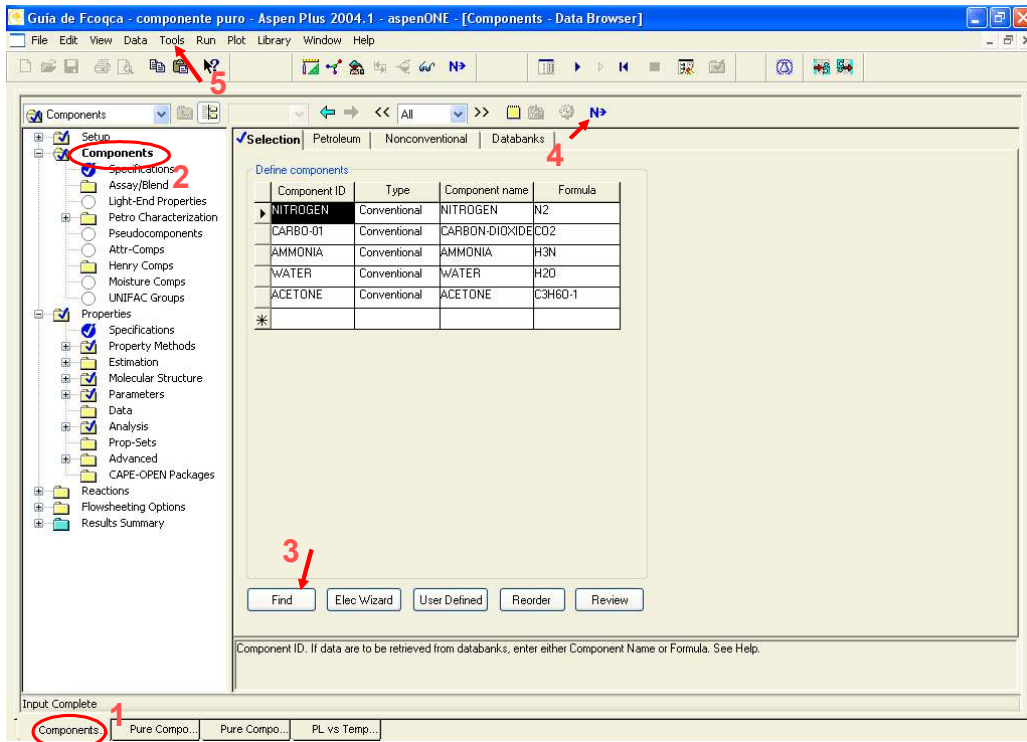
#### Paso 1

- 1) Cierre la ventana “Pure Component Properties Analysis” y diríjase mediante la primera pestaña inferior al Data Browser.
- 2) Seleccione Components.
- 3) A continuación de click en Find para adicionar los componentes deseados.
- 4) Click en Next hasta aparecer el siguiente cuadro de diálogo:



Oprima Cancel.

- 5) Una vez realizada esta acción ingrese nuevamente al modo de Pure components: “Tools→Analysis→Property→Pure...”



## Eliminar componentes

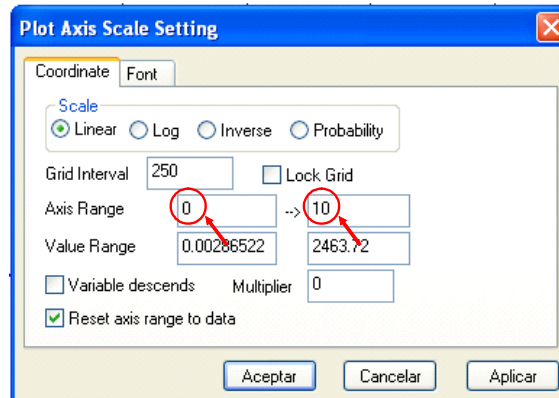
Para eliminar un componente, basta con seleccionar en el recuadro “Define components” la fila del componente que desea eliminar, dar click derecho y luego click en “Delete Row”.



### ANEXO 3. LECTURA DE GRÁFICOS

Para visualizar más fácilmente los gráficos y poder realizar lecturas de datos más precisas, modifique la escala de ambos ejes de la siguiente forma:

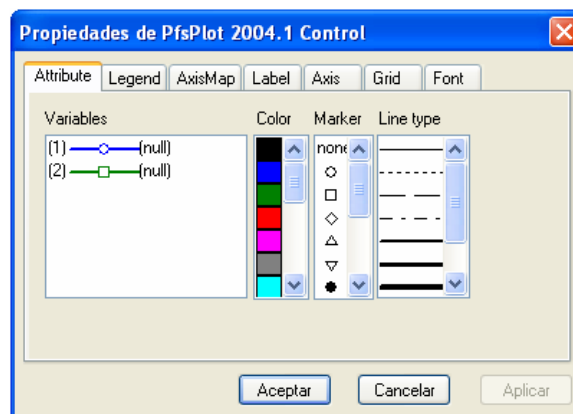
- i. Dé click derecho en cada eje y click en Edit...
- ii. En Axis Range introduzca el rango de valores que desea visualizar, por ejemplo:



- iii. Presione Aplicar y luego en Aceptar

Así mismo, puede modificar los colores de las líneas, el tipo, la forma de la flecha, etc., dando doble click en cada línea.

Otra forma de modificar los gráficos es dando click derecho en cualquier parte de la gráfica y luego click en Properties:



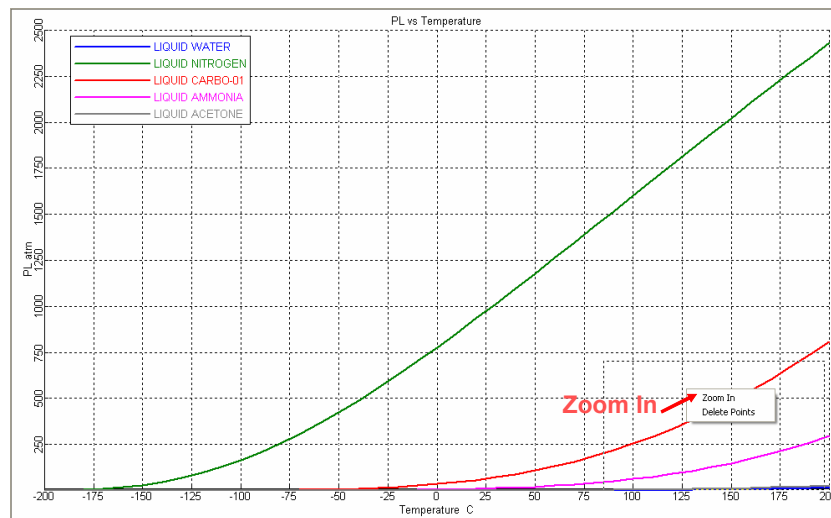
Explore las diferentes pestañas para personalizar las gráficas. En la pestaña Axis usted encontrará que puede modificar la escala de la gráfica.

## ZOOM

Otra forma de visualizar más fácilmente los puntos es realizando un zoom a alguna área específica del gráfico:

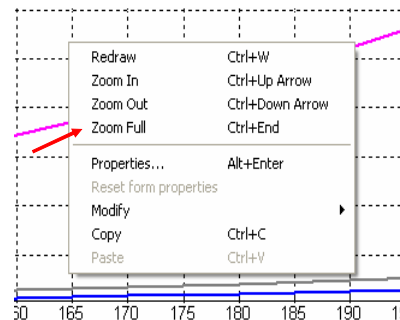
### Paso 1

Con el puntero del Mouse, dibuje el área de interés del gráfico presione el botón derecho del mouse. Luego de click en Zomm In.



### Paso 2

Para volver a la vista completa del gráfico, oprima el click derecho sobre cualquier punto del gráfico aumentado y luego dé click en Zoom Full. Si desea disminuir o aumentar un poco la imagen, de click en Zoom Out o Zoom In respectivamente.



## PLOT WIZARD

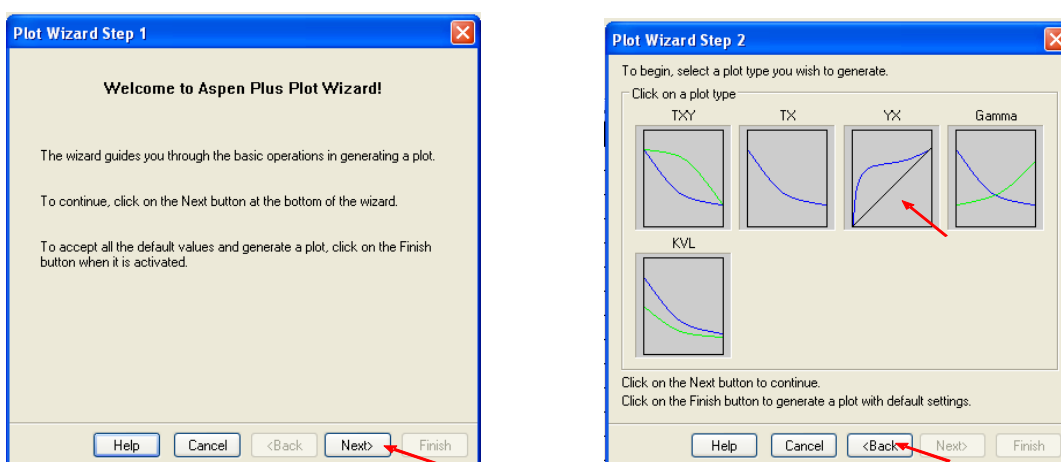
Una herramienta con la que cuenta ASPEN PLUS® es Plot Wizard que se encuentra dentro de los resultados generados por el modo de análisis binario, esta opción nos permite generar diferentes gráficas relacionadas con el análisis que se esté desarrollando.

## Paso 1

Cuando el simulador genere los resultados para sistema binario, diríjase a la pestaña *Binary Analysis Results* que contiene la tabla de resultados, en la parte inferior encontrará el icono de *Plot Wizard*, oprima este botón y aparecerá el asistente.

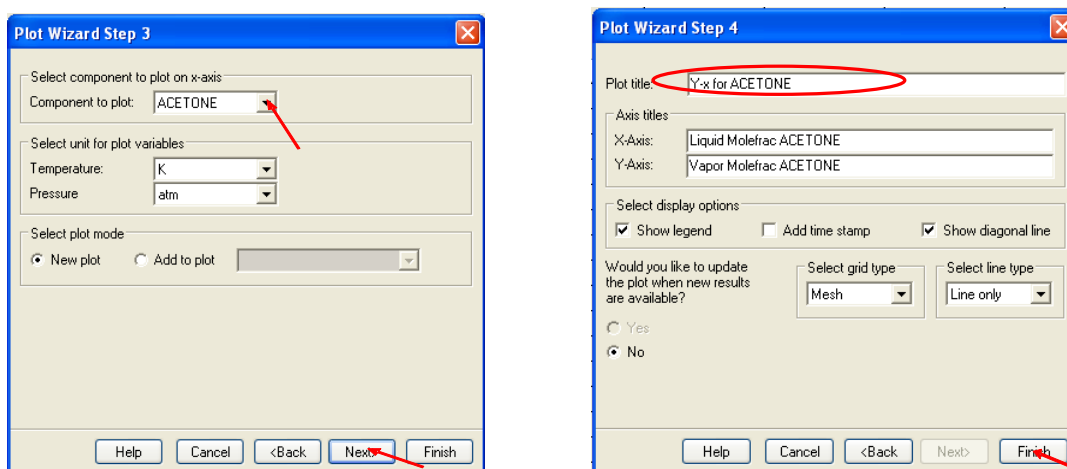
## Paso 2

Lea la descripción de la ventana y click en Next. En el segundo paso aparecen todas las gráficas que se encuentran disponibles. Estudiaremos la gráfica “x” vs. “y” para la acetona. En este diagrama el usuario puede leer la composición en el equilibrio del líquido y del vapor de la acetona.

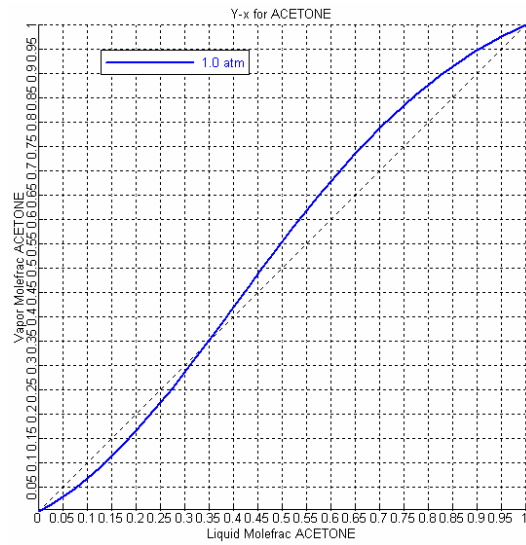


En el tercer paso se escoge el compuesto deseado y las unidades con que se quiere realizar la gráfica.

En el último paso se configura las preferencias personales de la gráfica, como los títulos. Para que ASPEN realice los cálculos presione *Finish*.



A continuación se muestra la gráfica que se obtendrá.



**DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA DE PROCESOS  
UNIVERSIDAD EAFIT**

**TERMODINÁMICA I**

**GUÍA PARA LA COMPRESIÓN DE CONCEPTOS TERMODINÁMICOS  
UTILIZANDO ASPEN PLUS®**

**Marcela Posada Mejía  
Ing. de Procesos EAFIT**

**Natalia Zapata Zapata  
Ing. de Procesos EAFIT**

## CONTENIDO

<b>1. OBJETIVOS GENERALES</b> .....	<b>4</b>
<b>2. SIMBOLOGÍA UTILIZADA EN ESTA GUÍA</b> .....	<b>5</b>
<b>3. PROCEDIMIENTO GENERAL PARA INGRESAR AL AMBIENTE DE SIMULACIÓN EN ASPEN PLUS Y DE PROPERTY ANALYSIS</b> .....	<b>6</b>
3.1. Pasos básicos para iniciar una simulación en ASPEN PLUS®.....	6
3.2. Pasos básicos para entrar a la interfase Property Analysis para componente puro .....	8
<b>4. SISTEMAS DE UN COMPONENTE</b> .....	<b>12</b>
4.1. OBJETIVOS ESPECÍFICOS .....	12
4.2. ALGUNOS CONCEPTOS FUNDAMENTALES Y SU APLICACIÓN EN ASPEN PLUS.....	12
4.2.1. <i>Calor específico</i> .....	12
4.2.2. <i>Energía Interna</i> .....	18
4.2.3. <i>Otras propiedades termodinámicas</i> .....	23
EJERCICIOS PROPUESTOS.....	24
4.3. BIBLIOGRAFÍA Y CIBERGRAFÍA.....	25
<b>5. DISPOSITIVOS DE INGENIERÍA DE FLUJO PERMANENTE: Compresores y Turbinas</b> .....	<b>26</b>
5.1. OBJETIVOS ESPECÍFICOS .....	26
5.2. ALGUNOS CONCEPTOS FUNDAMENTALES Y SU APLICACIÓN EN ASPEN PLUS.....	26
5.2.1. <i>Compresores</i> .....	26
5.2.2. <i>Turbinas</i> .....	34
5.3. EJERCICIOS PROPUESTOS.....	36
5.4. BIBLIOGRAFÍA Y CIBERGRAFÍA.....	36
<b>6. MÁQUINAS TÉRMICAS, CICLOS DE REFRIGERACIÓN Y BOMBAS DE CALOR</b> .....	<b>37</b>
6.1. OBJETIVOS ESPECÍFICOS .....	37

---

6.2. ALGUNOS CONCEPTOS FUNDAMENTALES Y SU APLICACIÓN EN ASPEN PLUS.....	37
6.2.1. <i>Depósitos de energía térmica</i> .....	37
6.2.2. <i>Máquina Térmica</i> .....	37
6.2.3. <i>Refrigeradores y bombas de calor</i> .....	48
6.2.4. <i>Ciclo de refrigeración por compresión de vapor</i> .....	51
6.3. BIBLIOGRAFÍA Y CIBERGRAFÍA.....	59

### LISTA DE ANEXOS

ANEXO 1. MODELOS TERMODINÁMICOS UTILIZADOS EN ESTA GUÍA .....	60
ANEXO 2. ¿CÓMO ADICIONAR O ELIMINAR COMPONENTES? .....	62
ANEXO 3. LECTURA DE GRÁFICOS.....	64
ANEXO 4. CONSTRUCCIÓN DE DIAGRAMAS DE FLUJOS EN ASPEN PLUS® .....	66

## GUÍA PARA LA COMPRENSIÓN DE ALGUNOS CONCEPTOS TERMODINÁMICOS UTILIZANDO ASPEN PLUS®

La presente guía se realiza para apoyar el proceso de aprendizaje de la asignatura Termodinámica I, la cual hace parte de las asignaturas del *área de las ciencias básicas de ingeniería*<sup>1</sup>, por medio de la herramienta computacional ASPEN PLUS®

“La Termodinámica es la ciencia que estudia las transformaciones de la energía y el cambio de las propiedades de las sustancias que intervienen en las transformaciones y es una base fundamental para el posterior estudio de asignaturas como Balances de Materia y Energía y las Operaciones Unitarias”.

El objetivo general de esta materia consiste en “Resolver problemas, tanto teóricos como prácticos, en procesos y ciclos termodinámicos, donde el estudiante desarrolle habilidades de aplicar las propiedades de las sustancias”<sup>2</sup>.

En la presente guía se estudian problemas prácticos mediante el simulador de procesos Aspen Plus el cual es una herramienta que ayuda en el afianzamiento de los conceptos adquiridos en clase. Los temas abordados en la guía son: “Propiedades termodinámicas para sistemas de un componente”, “Dispositivos de ingeniería de flujo permanente: Compresores y Turbinas” y “Máquinas térmicas, refrigeradores y bombas de calor”, los cuales hacen parte del programa académico de la asignatura Termodinámica I.

### 1. OBJETIVOS GENERALES

Como objetivos generales de las guías para la comprensión de conceptos básicos de las asignaturas correspondientes al *área de las ciencias básicas de ingeniería*<sup>1</sup> mediante el uso del simulador de proceso, se tienen:

- Introducir al estudiante al ambiente de simulación mediante el análisis de propiedades termodinámicas que ofrece ASPEN PLUS®.
- Apoyar la comprensión algunos conceptos adquiridos en la asignatura Termodinámica por medio del simulador de proceso.
- Utilizar la base de datos de propiedades termodinámicas que tiene disponible ASPEN PLUS® como una aplicación diferente de la simulación de procesos.

---

<sup>1</sup> Elemento de la clasificación de las áreas del conocimiento presentada en el documento “Contenidos programáticos de la ingeniería de procesos” de Jaime Escobar Arango. 2005.




<sup>2</sup> Tomado del programa académico de ingeniería de procesos para la asignatura de Termodinámica I, PR-050.



## 2. SIMBOLOGÍA UTILIZADA EN ESTA GUÍA

A continuación se presenta la simbología utilizada en esta guía.

SÍMBOLO	DESCRIPCIÓN
T	Temperatura
$T_b$	Temperatura de ebullición
P	Presión
$C_p$	Calor específico a presión constante
$C_v$	Calor específico a volumen constante
H	Entalpía
U	Energía Interna
S	Entropía
$\Delta S$	Cambio en la entropía
Q	Flujo de calor
W	Flujo de trabajo

	Este símbolo es de advertencia, cuando lo encuentre lea detenidamente su contenido, por que se debe tener en cuenta para el análisis que se está realizando.
	Este símbolo indica ayudas computacionales, vínculos de Internet o ayudas dentro del software Aspen.
	Cada vez que vea este símbolo encontrará ideas, comentarios o ayudas conceptuales.

### 3. PROCEDIMIENTO GENERAL PARA INGRESAR AL AMBIENTE DE SIMULACIÓN EN ASPEN PLUS Y DE PROPERTY ANALYSIS

#### 3.1. Pasos básicos para iniciar una simulación en ASPEN PLUS®

A continuación se explicarán los pasos básicos para comenzar a trabajar bajo el ambiente de ASPEN PLUS®:

##### Paso 1

La ruta para ingresar a ASPEN PLUS® es:

Inicio→Todos los programas→AspenTech→Aspen Engineering Suite→Aspen Plus 2004.1→Aspen PlusUser Interface.

##### Paso 2

Al ingresar a Aspen se muestra la ventana Aspen Plus Startup. Seleccione la opción Blank Simulation y presione OK



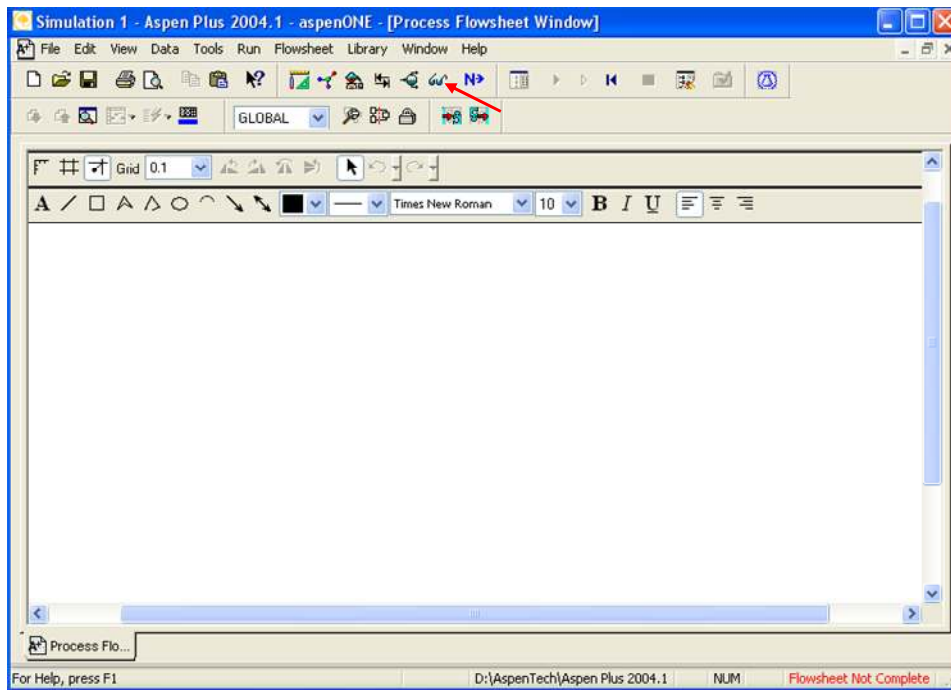
##### Paso 3

Luego aparece la ventana Connect to Engine, presione OK.



## Paso 4

A continuación se abre la ventana principal llamada Process Flowsheet Window.



A partir de este punto, el usuario dispone de innumerables opciones de simulación de procesos o sistemas. En esta guía se abordarán el análisis de propiedades mediante una interfase de Aspen Plus llamada **Property Analysis** y la simulación de procesos como tal (**Flowsheet**).

La *simulación de procesos* implica la construcción de diagramas de flujo en el *Process Flowsheet Window* los cuales contienen equipos y dispositivos de ingeniería unidos mediante las corrientes del proceso. La construcción de estos diagramas dependen del sistema, por tanto la explicación de cómo elaborarlos se hará de manera integrada con las preguntas de análisis.


Como una herramienta adicional a la simulación de procesos, se tiene la interfase *Property Analysis* de Aspen Plus la cual posee tres modos de trabajo:

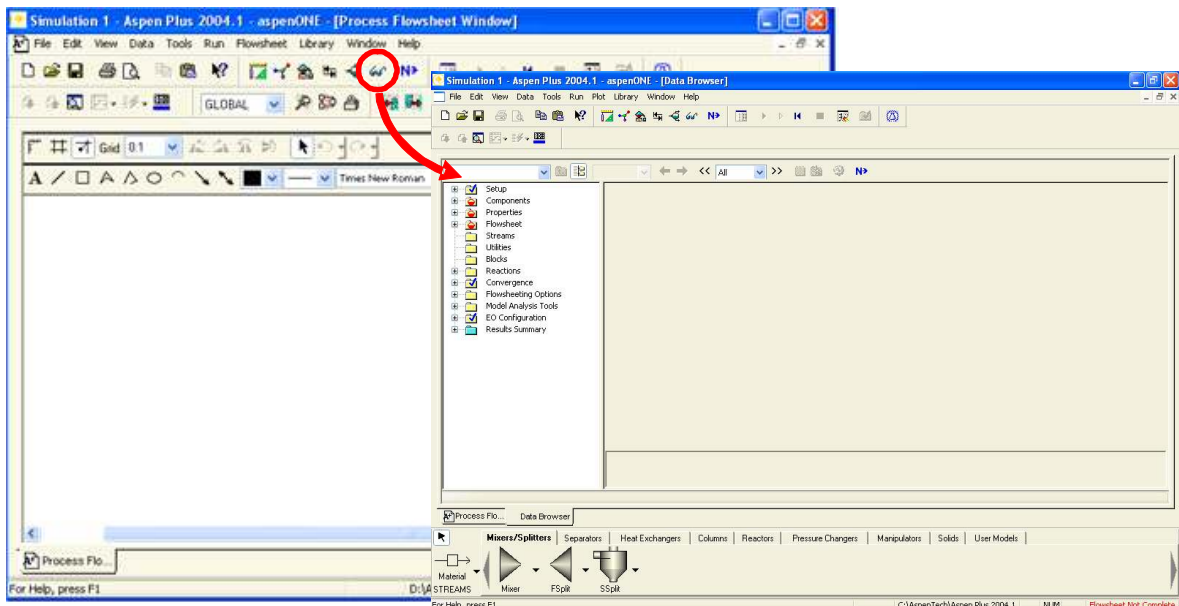
- ✓ Componente puro: con el cual se realiza el análisis de propiedades termodinámicas y de transporte para sistemas de un componente.
- ✓ Sistema binario: con el cual se construyen diagramas binarios  $T_x$ ,  $P_x$  y  $Y_x$  para sistemas de dos componentes.
- ✓ Curvas de residuo: en donde se construyen diagramas que muestran la trayectoria de la composición de una mezcla ternaria cuando es sometida al proceso de destilación con reflujo total. Estas curvas no serán estudiadas en la presente guía.

Los dos primeros modos son abordados en la “Guía para la comprensión de algunos conceptos fisicoquímicos utilizando Aspen Plus®”. Dentro de esta guía diseñada para la asignatura TERMODINÁMICA I solo se estudia el modo de Componente puro. Por tanto, solo se explica a continuación cómo iniciar el ambiente de análisis para el primer modo descrito anteriormente.

### 3.2. Pasos básicos para entrar a la interfase Property Analysis para componente puro

#### Paso 5

Seleccione el icono  ubicado en la barra de herramientas para dirigirse a la ventana Data Browser.

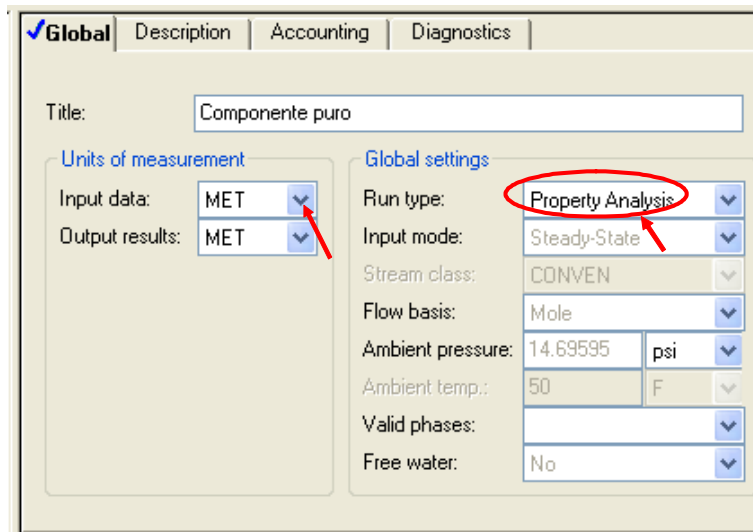



El Data Browser es una ventana en la que el usuario visualiza en forma jerárquica las entradas disponibles o habilitadas de la simulación o aplicación que se desea llevar a cabo.

Una vez allí, seleccione en el panel izquierdo Setup, inmediatamente aparecerá una ventana como se muestra abajo en la cual, si desea, puede copiar el título de la simulación.

En Units of measurement cambie las unidades de medida a métricas (*MET*).

Para realizar el análisis de las propiedades debe trabajar bajo el modo “Property Analysis”.




Finalmente oprima “Next”  ubicado en la parte superior de la ventana del Data Browser.

### Paso 6

A continuación se abre la ventana *Components Specifications* tal como se muestra en el panel izquierdo del Data Browser. Presione Find para ingresar los componentes a simular:

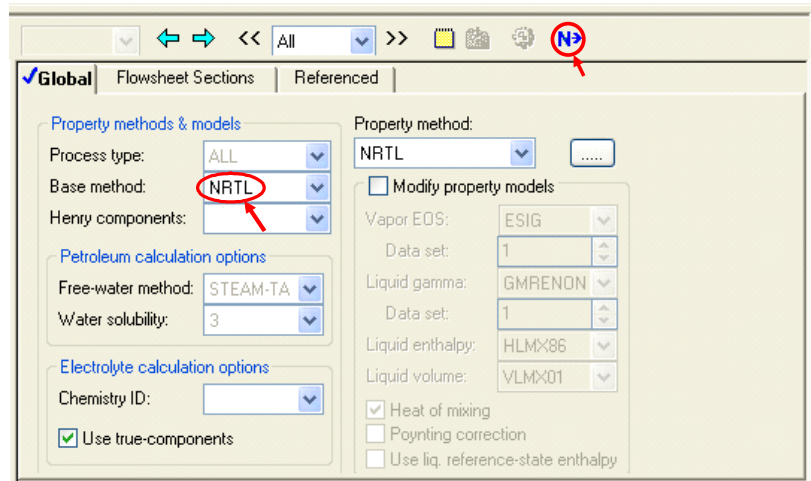
- Nitrógeno
- Dióxido de Carbono
- Argón
- Agua
- Oxígeno
- Helio

Escriba cada nombre o fórmula, seleccione el compuesto deseado y oprima Add. Click .

Component ID	Type	Component name	Formula
NITROGEN	Conventional	NITROGEN	N2
CARBO-01	Conventional	CARBON-DIOXIDE	CO2
ARGON	Conventional	ARGON	AR
WATER	Conventional	WATER	H2O
OXYGE-01	Conventional	OXYGEN	O2
HELIU-01	Conventional	HELIUM-4	HE-4
*			

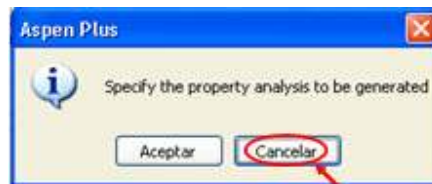
### Paso 7

Ingrese el paquete termodinámico más apropiado para el sistema. De acuerdo a los compuestos introducidos en el paso 6, escoja NRTL. (Ver ANEXO 1 para conocer más acerca de los modelos termodinámicos). Click **N**.



### Paso 8

Nuevamente presione Next. Le aparece un recuadro de información y en este presione Cancelar.

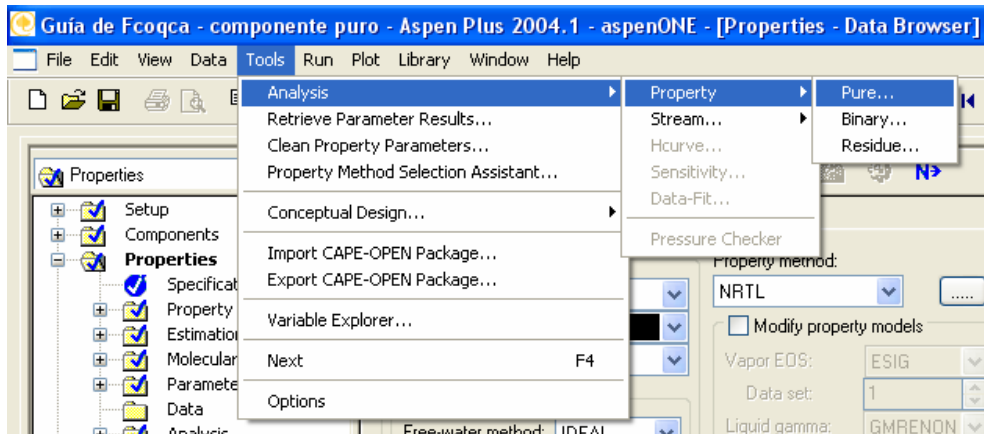


A veces, dependiendo del sistema, tendrá que presionar varias veces Next para que salga el cuadro de diálogo anterior. Aspen da la posibilidad de modificar las constantes termodinámicas y parámetros utilizados para los cálculos, para el objetivo de esta guía, esta función no se utilizará, por lo tanto se escoge la opción Cancelar.

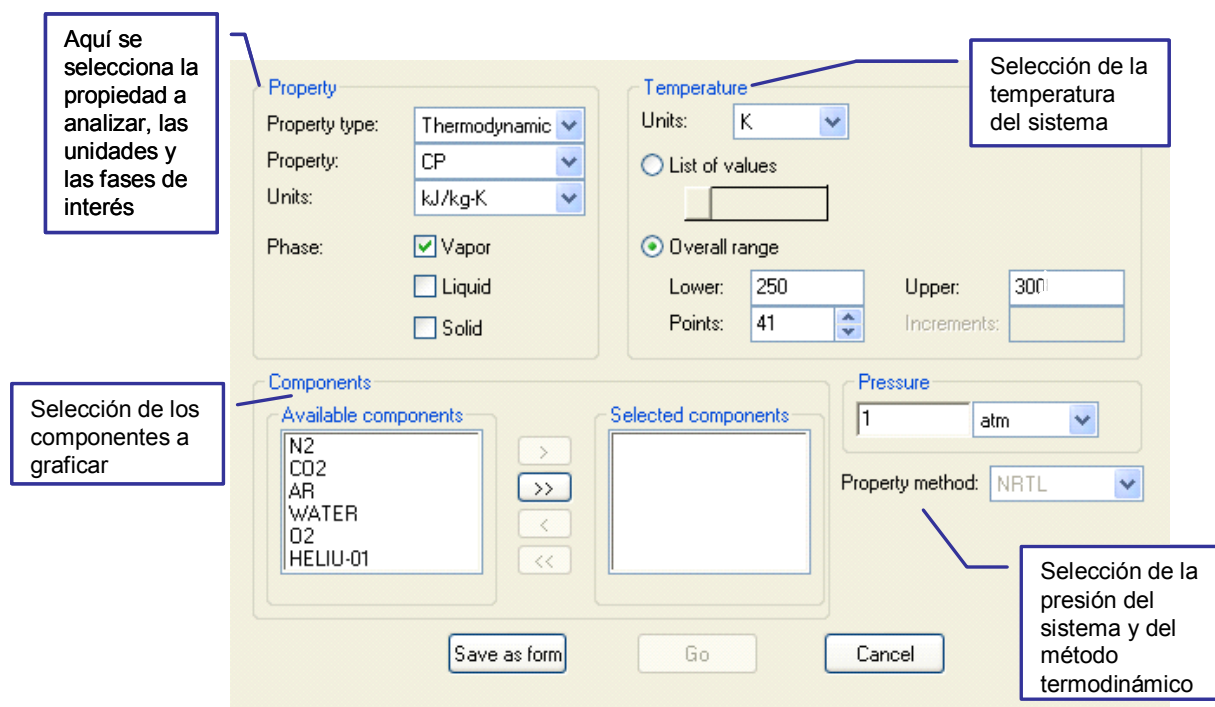
### Paso 9

A continuación siga los pasos mostrados en la ruta siguiente para entrar a la interfase de Property Analysis:

“Tools→Analysis→Property→Pure...”



Una vez realizado lo anterior, se abre la ventana que se muestra a continuación a partir de la cual se generan las gráficas de análisis de propiedades termodinámicas.



Al presionar Go se genera tanto el diagrama como una tabla de resultados.

## 4. SISTEMAS DE UN COMPONENTE

### 4.1. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Estudiar las propiedades termodinámicas de los compuestos químicos mediante la construcción de gráficas en el simulador y establecer un análisis comparativo entre ellos.
- Analizar la variación con la temperatura de las propiedades termodinámicas Calor específico y Energía interna.
- Identificar los puntos más relevantes de los compuestos en las gráficas de cada propiedad termodinámica vs. temperatura.

### 4.2. ALGUNOS CONCEPTOS FUNDAMENTALES Y SU APLICACIÓN EN ASPEN PLUS

A continuación se desarrollan las prácticas propuestas para la aplicación de los conceptos termodinámicos asociados a las propiedades Calor específico y Energía Interna, mediante el uso del simulador de proceso ASPEN PLUS®.

#### 4.2.1. Calor específico

El *calor específico* o capacidad calorífica específica ( $C$ ) se define como la energía requerida para elevar la temperatura de una unidad de masa de una sustancia en un grado; o dicho de otra forma, la mayor o menor dificultad que presenta una sustancia para experimentar cambios de temperatura bajo el suministro de calor. La Figura 1 ilustra un ejemplo de esta definición.

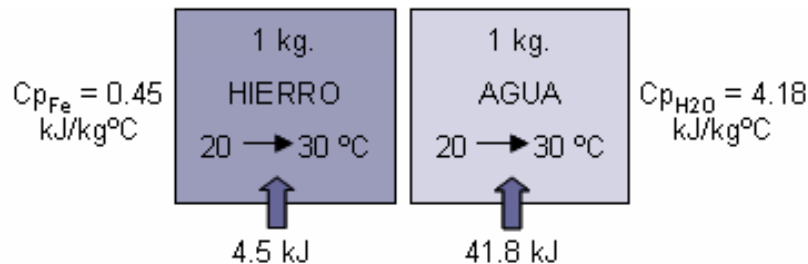


Figura 1. Calor específico de dos sustancias diferentes<sup>3</sup>

En la figura anterior, se ilustra un ejemplo en el que se desea aumentar separadamente la temperatura de un kilogramo de dos sustancias diferentes (hierro y agua) en 10 grados centígrados. La energía total necesaria para que un kilogramo de hierro eleve su temperatura en 10 grados es 4.5 kJ, mientras que un kilogramo de agua necesita 41.8 kJ para aumentar también en 10 grados su temperatura. Según esto y según la definición de calor específico anteriormente estudiada, para elevar la temperatura de un kilogramo de hierro en un grado

<sup>3</sup> Figura adaptada de la referencia 1.



centígrado es necesario 4.5 kJ dividido 10 °C es decir 0.45 kJ/ kg.°C y para elevar la temperatura de un kilogramo de agua en un grado centígrado es necesario 4.18 kJ/ kg.°C. Estos dos valores calculados corresponden al calor específico de ambas sustancias.

Se tiene en termodinámica dos tipos de calores específicos: *calor específico a volumen constante*,  $C_V$ , y *calor específico a presión constante*,  $C_P$ . El primero se considera como la energía requerida para aumentar la temperatura de una unidad de masa de una sustancia en un grado cuando el volumen permanece constante. El segundo significa lo mismo que el anterior pero a presión constante y siempre es mayor que  $C_V$  puesto que a presión constante el sistema se expande y la energía para este trabajo de expansión también debe suministrarse al sistema (1). Se tiene entonces que:

$$C_V = \left( \frac{\partial u}{\partial T} \right)_V \quad y \quad C_P = \left( \frac{\partial h}{\partial T} \right)_P \quad (4.1)$$

Donde,

$u$  : energía interna

$h$ : entalpía

$T$ : Temperatura

Esta propiedad se expresa en el sistema internacional como kJ/(kg.K) o en base molar kJ/(kmol.K).

La Figura 2 ilustra la diferencia entre ambos calores específicos:

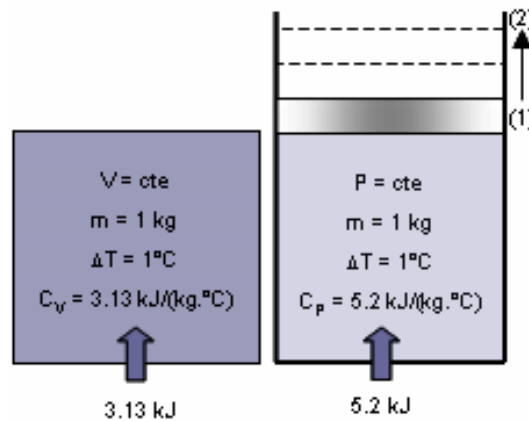


Figura 2. Calores específicos para el helio a volumen y presión constante<sup>3</sup>

### Pregunta de análisis 4.1

A partir de los conceptos estudiados anteriormente y mediante el uso del simulador de procesos encuentre:

1) ¿Cuáles son los valores de  $C_P$  y  $C_V$  (en kJ/kg-K) a 300 K y 1 atm que puede leer para cada uno de los siguientes gases? Compare los valores obtenidos con los reportados en la tabla A-2a del apéndice 1 del libro “Termodinámica” de Çengel y Boles o con cualquier otro texto de termodinámica.

Componente	$C_P$	$C_V$
Nitrógeno		
Dióxido de Carbono		
Argón		
Agua		
Oxígeno		
Helio		

2)Cuál tiene mayor  $C_P$  y  $C_V$ ? ¿Qué significa esto?

---

---

---

Para realizar este análisis siga los siguientes pasos en Aspen Plus:

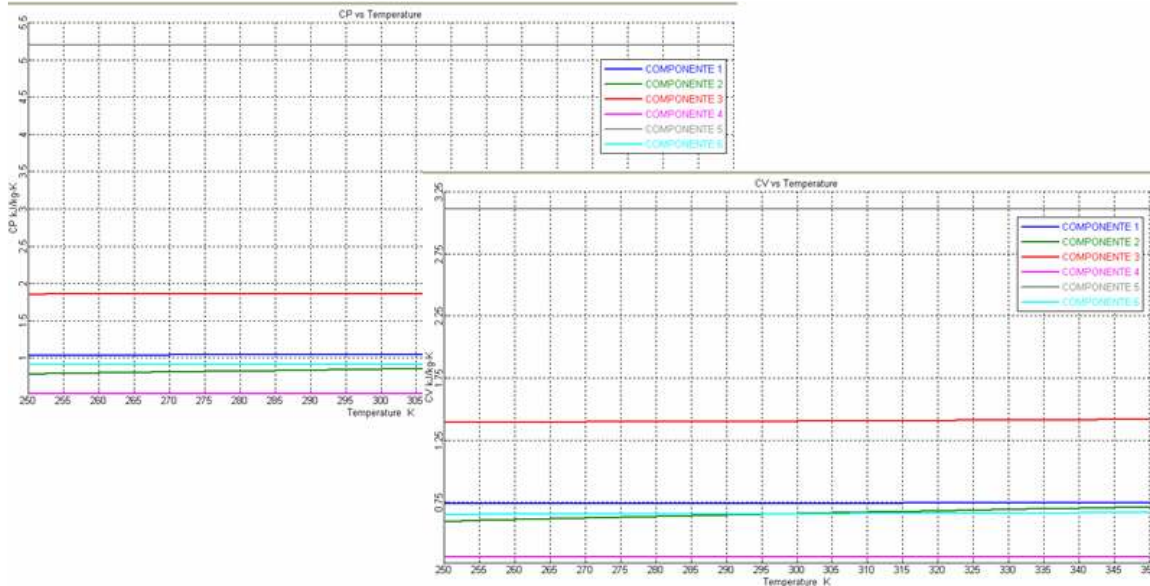
Si aún no se encuentra en el ambiente de simulación de Aspen o en la interfase *Property Analysis*, siga los pasos 1 a 9 de la sección 3. Seleccione en *Property* la propiedad “*Constant pressure heat capacity*”, **CP** (Calor específico o capacidad calorífica a presión constante para un componente puro), las unidades (kJ/kg-K) y la fase vapor. A continuación ingrese las unidades de la temperatura (K) y el rango dentro del cual se desea observar la variación del  $C_P$ : 250 K < T < 350 K. Ingrese luego la presión del sistema: 1 atm (14.69 psi).

En *Components*, seleccione el componente para el cual desea realizar el análisis y haga luego click en la flecha sencilla “>”. Si desea analizar todos los componentes en una sola gráfica, haga solo click en la doble flecha “>>”.

Tenga presente que esta interfase está diseñada para componente puro y no para mezcla de componentes, por tanto al seleccionar varios componentes usted podrá establecer una comparación de la propiedad termodinámica mas no analizar la mezcla de estos.

Finalmente presione “Go” para que ASPEN muestre la curva de Calor específico a presión constante de los componentes puros seleccionados.

Repita este procedimiento para la propiedad **CV** (Calor específico a volumen constante para un componente puro).



**Sugerencia:** Para una mejor visualización de los valores de  $C_P$  y  $C_V$  para cada componente, modifique la escala de ambos ejes. Para conocer cómo realizar esta acción remítase al ANEXO 3. Igualmente, puede leer los valores en la tabla de resultados “Pure Component Properties Analysis Results”.

## Pregunta de análisis 4.2

### Falso y Verdadero

Siguiendo los pasos 1 a 9 descritos en la sección 3 y de manera similar, el procedimiento en Aspen Plus descrito en la Pregunta de análisis 4.1, escoja los componentes necesarios y construya la gráfica que considere apropiada para encontrar la respuesta a las siguientes preguntas de falso y verdadero. Justifique si la afirmación es falsa.

Sugerencia: Para adicionar otros componentes, remítase al ANEXO 2 “¿Cómo adicionar o eliminar componentes?”.

a) Los calores específicos de gases con moléculas complejas (con 2 o más átomos) son más bajos que el de otros gases y disminuyen con la temperatura.

---

---

b) La variación de los calores específicos a presión constante para gases ideales es suave y puede aproximarse a la linealidad.

---

---

c) Los calores específicos de gases monoatómicos como el Argón, el Neón y el Helio, permanecen constantes a lo largo del intervalo de temperatura.

---

---

d) Los calores específicos a volumen y presión constantes son diferentes para sustancias incompresibles<sup>4</sup> a una temperatura determinada ( $C_P \neq C_V$ ).

---

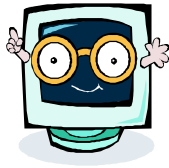
---

Sugerencia: Realice el análisis de la pregunta d) para la Plata (Silver) y el Plomo (Lead) sólidos a 25 °C. Cambie el modelo termodinámico por “SOLIDS” (Ver siguiente recuadro para conocer cómo hacer esta acción). Verifique los valores con la tabla A-3a de la referencia 1.

---

<sup>4</sup> **Sustancia incompresible:** Sustancia cuyo volumen específico o densidad es constante en un proceso. Los sólidos y líquidos son incompresibles. Definición adaptada de la referencia 1.

---



### CAMBIO DEL MODELO TERMODINÁMICO

Para cambiar el modelo termodinámico, cierre las ventanas del *Property Analysis*, diríjase al *Data Browser* y ubíquese en la carpeta Properties → Specifications.

Seleccione allí, en Base Methods el modelo deseado, oprima *Next* y luego *Cancelar* e ingrese nuevamente en la interfase para el análisis de propiedades para componente puro o continúe con la simulación en curso.

#### 4.2.1.1. Constante de adiabaticidad

Se puede definir una variable adicional llamada *Constante de adiabaticidad* que se simboliza con la letra griega gamma ( $\gamma$ ) y se expresa mediante la siguiente ecuación:

$$\gamma = C_P / C_V \quad (4.2)$$

$\gamma$  es una constante adimensional que depende del estado del gas por lo que existen tablas donde se tabula gamma para varios gases. Esta relación es útil para resolver problemas de dinámica de gases.

### Pregunta de análisis 4.3

#### Verifique

El valor de la relación de calores específicos  $C_P/C_V$  para gases monoatómicos es 1.667 y para gases diatómicos es comúnmente 1.4. Verifique esta afirmación mediante una gráfica en Aspen Plus para al menos 3 componentes. Incluya el análisis del aire.

Para realizar este análisis, siga los pasos 1 a 9 descritos en la Sección 3 y de manera similar, siga el procedimiento en Aspen Plus descrito en la Pregunta de análisis 4.1.

Ingrese los componentes que considere apropiados para dar respuesta a la pregunta.

Sugerencia: Para adicionar otros componentes, en este caso el aire, remítase al ANEXO 2 “¿Cómo adicionar o eliminar componentes?”.

### 4.2.2. Energía Interna

Toda materia está constituida por partículas: átomos, iones y moléculas que están asociadas a formas de *energía microscópicas* relacionadas con su estructura molecular y grado de actividad. Todas las partículas que forman la materia se encuentran en constante movimiento (energía cinética) por lo que se habla entonces de *energía sensible* (Ver Figura 3). La energía interna asociada con las fuerzas intermoleculares de una fase (sólida, líquida, gas) se conoce como *energía latente*. La energía asociada con los enlaces atómicos se llama *energía química* y cambia cuando suceden reacciones químicas. Finalmente, se tiene la *energía nuclear* la cual está relacionada con los enlaces dentro del núcleo de un átomo. Y la suma de todas estas formas de energía microscópicas es lo que se conoce como **energía interna, U**. (1)

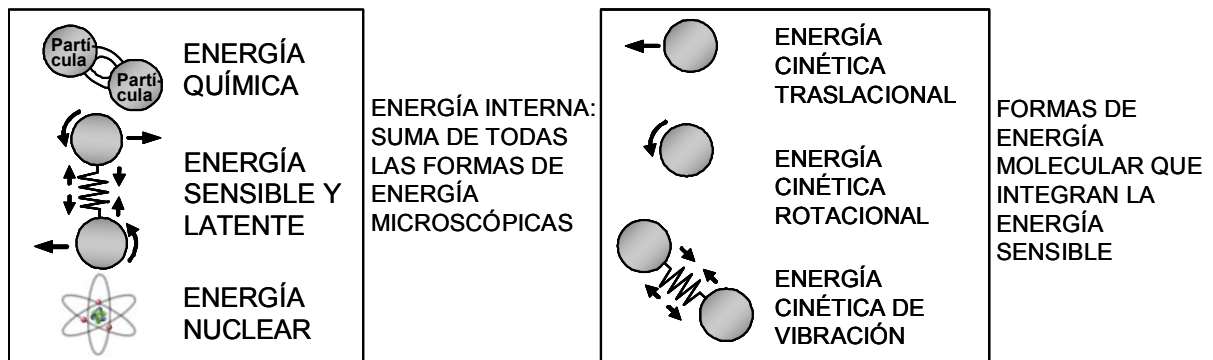


Figura 3. Energía interna<sup>5</sup>

La energía interna es una variable de estado, como la temperatura y la presión, que solo depende del estado del componente y no del proceso. La primera ley de la termodinámica define la energía interna (U) como la diferencia entre el calor transferido (Q) dentro de un sistema y el trabajo (W) realizado por el sistema:

$$U_2 - U_1 = Q - W \quad (4.3)$$

La energía interna es una forma de energía como lo es la energía potencial o la energía cinética. De la misma manera como la energía potencial puede ser convertida a energía cinética, la energía interna de un sistema termodinámico puede ser convertida a energía cinética o potencial. Esta energía puede ser almacenada en un sistema. En cambio, el trabajo o el calor no pueden ser conservados independientemente desde que estos dependan del proceso. (2)

<sup>5</sup> Imagen adaptada de la referencia 1

#### Pregunta de análisis 4.4

##### Verdadero y Falso

Siguiendo el procedimiento en Aspen Plus descrito más adelante, escoja los componentes necesarios (Ver ANEXO 2) y construya la gráfica que considere apropiada para encontrar la respuesta a las siguientes preguntas de falso y verdadero. Justifique si la afirmación es falsa.

- a) La fase líquida posee mayor energía interna almacenada puesto que son mayores las fuerzas intermoleculares en esta fase que en la fase gaseosa. Explique su respuesta en términos de energías microscópicas.

---

---

- b) La energía interna disminuye con el aumento de temperatura y la disminución de presión.

---

---

- c) La energía interna entre gases monoatómicos y diatómicos tales como el He, Ar, Ne, O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> y Cl<sub>2</sub> es muy similar dentro de un amplio rango de temperatura.

---

---

- d) La curva de variación de la energía interna con la temperatura tiene una tendencia exponencial.

---

---

Para contestar las anteriores preguntas siga los siguientes pasos en Aspen:

Si aún no se encuentra en la interfase de *Property Análisis*, siga los pasos 1 a 9 de la sección 3. Luego, en *Property* seleccione la propiedad **U** (Energía interna).

A continuación, ubíquese en *Phase* y seleccione las fases necesarias; luego seleccione en *Components* los compuestos escogidos para dar respuesta a cada pregunta y adiciónelos con las flechas.

Ingrese las unidades de la temperatura, el rango y la presión del sistema. Finalmente presione Go para graficar U vs. Temperatura.

Recuerde que para responder las preguntas a) a e) debe construir los gráficos que considere apropiados para dar solución a cada una de estas.



Recuerda que no es posible calcular un valor absoluto de Energía interna (U) ni de entalpía (H). En física, solo tiene significado una diferencia de energía, por tanto, estas propiedades se miden respecto a un **Estado de Referencia**.

Aspen Plus al igual que muchos textos, toma como punto de referencia 25 °C y 1 atmósfera de presión. Según esto, un valor de  $H_{\text{vap}} = 500 \text{ kJ/mol}$  a 110 °C y 1 atm, significa que el cambio en la entalpía de vaporización desde el estado de referencia, es decir, desde 25 °C y 1 atm, hasta el nuevo estado (110 °C y 1 atm), es de 500 kJ por cada mol del componente en cuestión.

#### Pregunta de análisis 4.5

*Verifica*

Comprueba la afirmación del recuadro anterior mediante una gráfica en Aspen Plus de U (en kJ/kg) vs. T para los siguientes componentes en su fase sólida dentro del rango de temperatura  $0 < T < 50 \text{ °C}$ . ¿Qué puede observar?

- |             |           |
|-------------|-----------|
| a) Aluminio | b) Hierro |
| c) Cobre    | d) Plata  |

Sugerencia: Realice este análisis con el modelo termodinámico "SOLIDS" (Para conocer cómo hacer esta acción, vea el recuadro "Cambio del modelo termodinámico" ubicado después de la Pregunta de análisis 4.2, Pág. 17).

#### Pregunta de análisis 4.6

*Encuentre*

- 1) Construya en Aspen Plus una gráfica de U vs. T para los siguientes componentes en fase líquida a 1 atm de presión, observe los puntos de




inflexión correspondientes a la temperatura crítica<sup>6</sup> y escriba este valor para cada uno.

- a) Acetona: \_\_\_\_\_
- b) Nitrógeno: \_\_\_\_\_
- c) Agua: \_\_\_\_\_
- d) Amoniaco: \_\_\_\_\_

Para dar respuesta a esta pregunta, siga los pasos 1 a 9 descritos en la sección 3 y de manera similar, siga el procedimiento en Aspen Plus descrito en la Pregunta de análisis 4.4.

Sugerencias:

- ✓ Ingrese un rango de temperatura entre  $-200^{\circ}\text{C} < T < 500^{\circ}\text{C}$ .
- ✓ Para una mejor lectura de los valores vea el ANEXO 1: Lectura de gráficos.



**¡TENGA CUIDADO!**

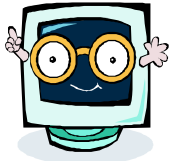
Aspen Plus no reconoce en las gráficas generadas en *Properties Analysis* en qué momento pasa un componente a otra fase, es decir, no interrumpe una curva en el punto de ebullición o de fusión según la fase que se grafique (en la anterior pregunta de análisis podrá comprobar esta afirmación), por lo tanto es necesario tener sumo cuidado con esta advertencia y tenerla presente para el análisis de las demás propiedades y así evitar confusiones.

- 2) Teniendo en cuenta el cuadro de advertencia anterior y siguiendo los pasos en Aspen Plus descritos en el recuadro siguiente, compruebe para la gráfica generada el punto de ebullición normal (a 1 atm de presión) y la presión crítica de cada componente.

Componente	$T_b$	$P_c$
Acetona		
Nitrógeno		
Agua		
Amoniaco		

Para resolver el punto, siga los pasos descritos en el siguiente recuadro:

<sup>6</sup> **Temperatura crítica:** Es la máxima temperatura a la que pueden coexistir el gas y el líquido. La misma definición aplica para la presión crítica. A partir del punto crítico (T y P críticos) las dos fases no se distinguen y el fluido no es licuable por más presión que se aplique.



**Nota:** Compruebe los *puntos de ebullición normal* de cada componente en la base de datos de Aspen, “*Databanks*”. Para esto, dirijase a *Components* en el *Data Browser*, dé click en *Find*, escriba el nombre del componente y “Enter”.

Si observa los datos junto al nombre del componente mediante la barra de desplazamiento, encontrará que para cada uno figura la fórmula, el nombre alternativo, el peso molecular (MW), el *punto de ebullición normal* (BP), el número de CAS<sup>7</sup> y la clase de componente.

Otra forma de comprobar ciertos valores para cada componente es la siguiente: Cierre primero las ventanas del Properties Analysis y dirijase al *Data Browser*, dé click en *Components*, y luego en el botón inferior derecho “*Review*”.

Input

Pure component scalar parameters

Parameters	Units	Data set	Component	Component	Component	Component	Component	Component
			NITROGEN	CARBO-01	AMMONIA	WATER	ACETONE	
GMUQQ		1	1.088000000	1.292000000	.980000000	1.400000000	2.336000000	
GMUQR		1	1.041530000	1.298620000	.909690000	.920000000	2.573500000	
HCDM	cal/mol	1			-75673.54543		-3.9624534E+5	
MUP	debye	1	0.0	0.0	1.468985491	1.849723721	2.881012036	
MW		1	28.01348000	44.00980000	17.03056000	18.01528000	58.08004000	
OMEGA		1	.0377215000	.2236210000	.2526080000	.3448610000	.3065270000	
PC	atm	1	33.55539107	72.86454478	111.3249445	217.6659265	46.39526277	
RGYR	meter	1	5.4710000E-11	1.0400000E-10	8.5330000E-11	6.1500000E-11	2.7460000E-10	
RKTZRA		1	.2899700000	.2725600000	.2466900000	.2431720000	.2446800000	
S025E	cal/mol-K	1	45.76502341	50.36959014	69.70108436		122.2496178	
SG		1	.3000000000	.3000000000	.3000000000	1.000000000	.7860000000	
TB	K	1	77.34400000	194.7000000	239.7200000	373.1500000	329.4400000	
TC	C	1	-146.9500000	31.06000000	132.5000000	373.9800000	235.0500000	
VB	cc/mol	1	34.67230000	35.01890000	24.98010000	18.83080000	77.46590000	
VC	cc/mol	1	89.21000000	94.00000000	72.47000000	55.94780000	209.0000000	
VLSTD	cc/mol	1	53.55780000	53.55780000	53.55780000	18.05000000	73.99620000	
ZC		1	.2890000000	.2740000000	.2420000000	.2290000000	.2330000000	
*								

Critical temperature. → Al seleccionar un símbolo puede saber mediante la leyenda inferior qué propiedad es.

<sup>7</sup> El número registrado CAS, Chemical Abstracts Service, es una identificación numérica única que asigna la Sociedad Química Americana para compuestos químicos, polímeros, secuencias biológicas, preparados y aleaciones que han sido descritos en la literatura. Definición adaptada de Wikipedia. La Enciclopedia Libre. <http://es.wikipedia.org>

### 4.2.3. Otras propiedades termodinámicas

El modo de *Property Analysis* de Aspen Plus trabaja muchas más propiedades termodinámicas tales como:

- Energía libre de Gibbs ( $G$  y  $\Delta G$ )
- Entalpía de vaporización ( $H_{\text{vap}}$  y  $\Delta H_{\text{vap}}$ )
- Presión de vapor ( $P_V$ )
- Entropía ( $S$  y  $\Delta S$ )
- Coeficiente de fugacidad ( $f$ ), entre otras.

Las tres primeras propiedades mencionadas se estudian en la “*Guía para la comprensión de algunos conceptos fisicoquímicos utilizando Aspen Plus®*” diseñada para la asignatura Fisicoquímica; la propiedad Entropía no se incluye en este capítulo y en lugar de esto, se estudia en la sección 5 de esta guía a partir sistemas de compresión y generación de potencia, sin embargo se propone ser estudiada también en la interfase *Property Analysis* para componentes puros.

**NOTA:** Si se desea estudiar estas propiedades es necesario tener en cuenta que dentro de la interfase *Property Analysis* de Aspen Plus el símbolo delta ( $\Delta$ ) se expresa como “D”.

## EJERCICIOS PROPUESTOS

Construya en Aspen Plus la gráfica que considere adecuada y adicione los componentes necesarios (Ver ANEXO 2) para responder las siguientes preguntas:

- 1) Construya un gráfico de  $C_P$  vs.  $T$  para el agua en sus fases líquido y vapor y responda: ¿Cuál de las dos fases presenta mayor calor específico? ¿Cómo puede explicar esto?

Sugerencia: Introduzca un intervalo de temperatura entre  $0 < T < 250$  °C

- 2) Para el diagrama de  $C_P$  vs  $T$  de la acetona y el agua en sus fases líquido y vapor, responda: ¿Cuál de los dos componentes tiene mayor  $C_P$ ? ¿A qué se debe esto?
- 3) Cómo puede explicar con la ayuda del simulador de procesos y según la siguiente ecuación, el comportamiento de la curva del agua respecto a la temperatura.

$$C_P = \left( \frac{\partial h}{\partial T} \right)_P$$

- 4) Construya en Aspen Plus una gráfica de  $U$  vs.  $T$  para las tres fases (sólido, líquido y vapor) para la Acetona y responda: ¿Cuál fase presenta mayor energía interna? ¿A qué se debe esto?
- 5) Un recipiente rígido contiene 2 kg de refrigerante 12 a 900 kPa y 80 °C en estado líquido. Determine la energía interna total.
- 6) Ordene en forma descendente de cantidad de energía interna los siguientes componentes:

- \_\_\_ Amoniaco
- \_\_\_ Acetona
- \_\_\_ Agua
- \_\_\_ Benceno
- \_\_\_ Dióxido de carbono
- \_\_\_ Nitrógeno

Sugerencia: Ver ANEXO 2 ¿Cómo adicionar o eliminar componentes?

- 7) La energía interna del Hierro a 25°C y 1 atm de presión es \_\_\_\_\_ kJ/kg

Sugerencia: Cambie el modelo termodinámico a SOLIDS.

### **4.3. BIBLIOGRAFÍA Y CIBERGRAFÍA**

1. ÇENGEL, Y. BOLES, M. Termodinámica. Tomo I. Segunda Edición. Editorial Mc Graw Hill. México. 1996.

2. First Law of Thermodynamics. NASA.

<http://www.grc.nasa.gov/WWW/K-12/airplane/thermo1.html>

Fecha de consulta: Julio de 2006

## 5. DISPOSITIVOS DE INGENIERÍA DE FLUJO PERMANENTE: Compresores y Turbinas

### 5.1. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Apoyar la comprensión de los conceptos asociados a sistemas de compresión y generación de potencia en turbinas, mediante el uso del simulador de procesos.
- Introducir los conceptos de entropía y procesos isentrópicos y politrópicos.
- Analizar el comportamiento de compresores y turbinas con la variación de las temperaturas y presiones de entrada y salida, y eficiencia de los dispositivos en cuestión.

### 5.2. ALGUNOS CONCEPTOS FUNDAMENTALES Y SU APLICACIÓN EN ASPEN PLUS

Se llaman *dispositivos de flujo permanente* a aquellos dispositivos que operan teóricamente bajo las mismas condiciones durante largos períodos de tiempo. Algunos son: Toberas, difusores, compresores, turbinas, bombas, intercambiadores de calor, entre otros. Las turbinas y compresores por ejemplo, operan en centrales eléctricas sin parar durante meses.

A continuación se desarrollan las prácticas propuestas para la aplicación de los conceptos termodinámicos asociados a los compresores y turbinas mediante el uso del simulador de proceso ASPEN PLUS®.

#### 5.2.1. Compresores

Los compresores son mecanismos para comprimir gases. Se suelen llamar bombas de aire. Esta máquina se encarga de disminuir el volumen de una determinada cantidad de aire y aumentar su presión por procedimientos mecánicos. El trabajo es suministrado a estos dispositivos por una fuerza externa mediante un eje rotatorio. (1)

El aire comprimido posee una gran energía potencial, ya que si eliminamos la presión exterior, se expandiría rápidamente. El control de esta fuerza expansiva proporciona la fuerza motriz de muchas máquinas y herramientas, como martillos neumáticos, taladradoras, limpiadoras de chorro de arena y pistolas de pintura. (3)

Hoy en día existen dos tipos de compresores:

- Alternativos
- Rotatorios

El compresor de émbolo o alternativo funciona como un motor de pistón, mientras que el rotativo utiliza la fuerza centrífuga para aumentar la presión del gas, de modo semejante a una bomba hidráulica.

Tanto en compresores como en turbinas los términos de la ecuación de energía se tratan de la siguiente forma (1):

**Q≅0** → La transferencia de calor para estos dispositivos es pequeña respecto del trabajo del eje, por tanto, este término se puede despreciar si no hay enfriamiento.

**W≠0** → Puesto que estos dispositivos implican ejes rotatorios, este término es muy importante. En turbinas, representa la salida de potencia, por lo que su signo es positivo; y en compresores representa la entrada de potencia (Signo negativo).

**ΔEP≅0** → Este término es usualmente despreciado por lo que el cambio en la energía potencial de los fluidos que fluyen a través de turbinas y compresores es muy pequeño.

**ΔEC≅0** → Las velocidades de los fluidos que fluyen por compresores son muy bajas, por tanto el cambio en la energía cinética se omite. Aunque en turbinas las velocidades tienen un valor considerable, el cambio en la energía cinética es muy pequeño comparado con el cambio en la entalpía, por lo que es también despreciado.

La ecuación de energía se expresa como:

$$Q - W = m (\Delta h + \Delta EP + \Delta EC) \quad (5.1)$$

Donde,

Q: Calor transferido

W: Trabajo realizado por o hacia el sistema

m: Flujo másico

Δh: Cambio en la entalpía

ΔEP: Cambio en la energía potencial del sistema

ΔEC: Cambio en la energía cinética del sistema

---

### Pregunta de análisis 5.1

*Resuelva en Aspen Plus:*

Se comprime aire isentrópicamente a 100 kPa y 30 °C hasta 500 kPa. El flujo másico del aire es 0.05 kg/s. Con la ayuda del simulador de procesos, responda:

¿Cuál es potencia suministrada al compresor? \_\_\_\_\_

¿Cuál es la temperatura de salida del aire? \_\_\_\_\_

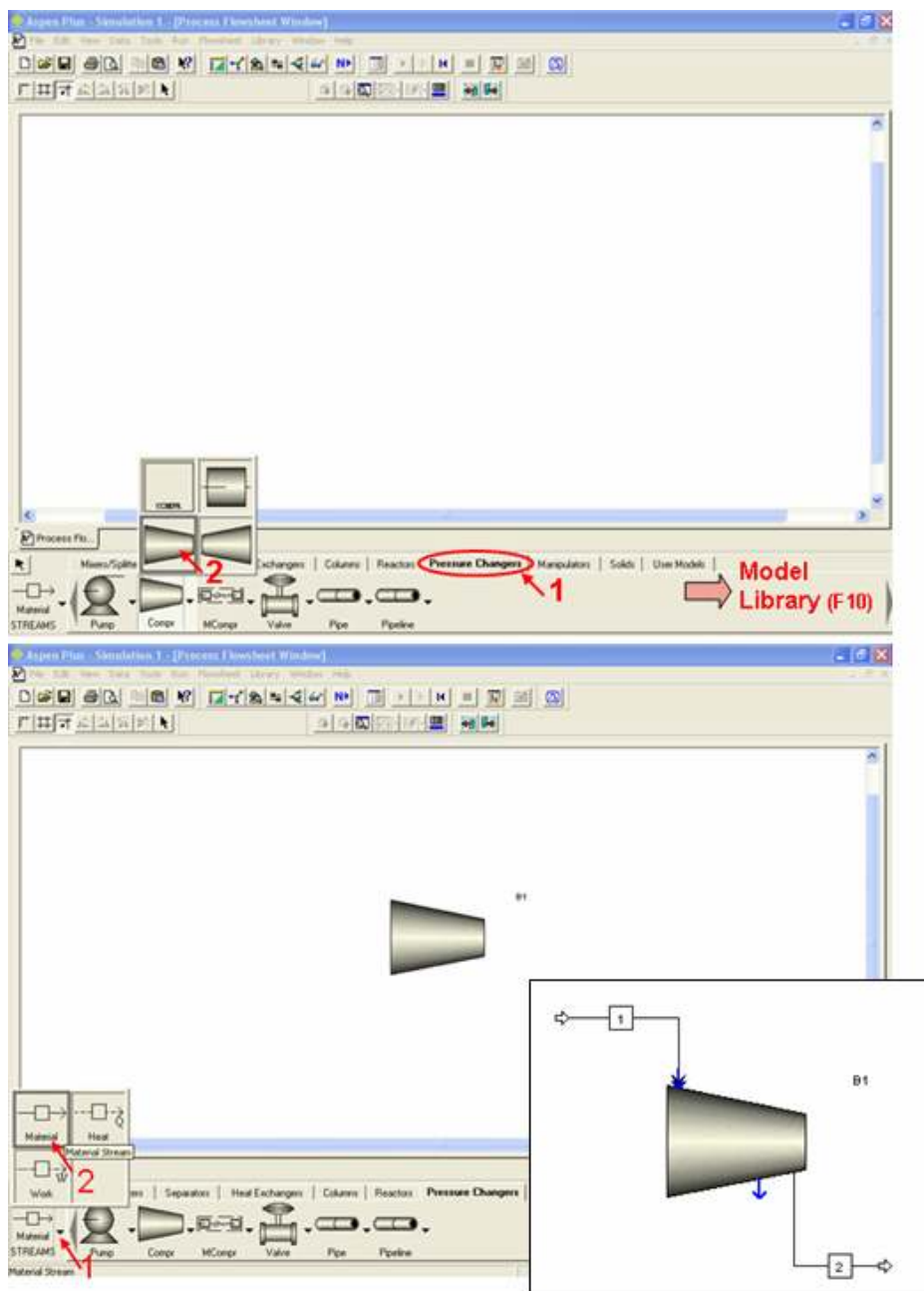
¿Cuál es el cambio en la entalpía? \_\_\_\_\_

¿Cuál es la eficiencia que utiliza Aspen Plus por defecto? \_\_\_\_\_

Para realizar este análisis siga los siguientes pasos en Aspen Plus:



Si aún no se encuentra en el ambiente de simulación de Aspen, siga los pasos 1 a 4 de la sección 3.

A continuación seleccione en el *Model Library* la pestaña *Pressure Changers*. (Si esta barra no está visible, presione F10). Luego seleccione el dispositivo (Compresor) que se muestra en la siguiente figura y ubíquelo en el espacio en blanco (Flowsheet). Ingrese las corrientes como se muestra a continuación:

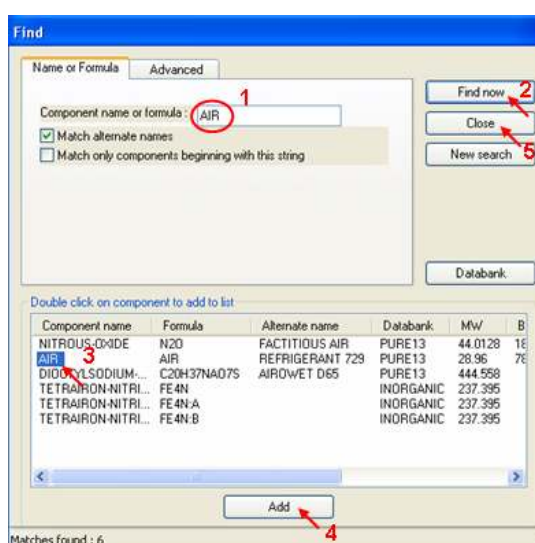





Para conocer más acerca de cómo construir diagramas de flujos en Aspen Plus remítase al ANEXO 4. Allí se le explica cómo ingresar y reconectar las corrientes además de algunos “trucos” de interés.


Finalmente, click en Next:  y luego en Aceptar. Esto lo llevará al Data Browser. Ingrese el título de la simulación y en Units of measurement seleccione SI (Sistema Internacional). Click .

A continuación oprima Find e ingrese el componente de interés, en este caso, el aire, presione Find Now, seleccione el compuesto, presione Add y finalmente oprima Close.



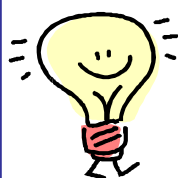
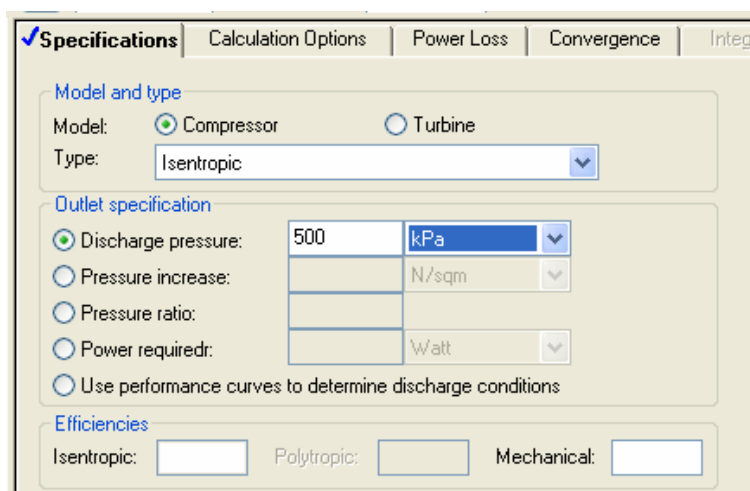
Click .

En Base method, escoja el paquete termodinámico más apropiado según los componentes del sistema. Para este sistema por tratarse de un gas ideal, utilice el modelo de NRTL. (Ver ANEXO 1 para conocer más acerca de los modelos termodinámicos). Click . Presione OK en el cuadro de diálogo “Required Properties Input Complete”.

Ingrese las variables de la corriente 1: Temperatura, presión, flujo, composición. En Total Flow, seleccione las unidades másicas (Mass) e ingrese el valor del flujo másico. De igual forma, en Composition seleccione Mass-Frac e ingrese el valor 1 (esto ya que entra 100% Aire por la corriente 1). Click .

Seleccione en Model: Compresor y en Type seleccione el modelo isentrópico (Isentropic).


En Outlet specification, seleccione Discharge pressure e ingrese la presión de descarga. En este caso, 500 kPa.




La **compresión politrópica** es aquella en la que la relación entre la presión y el volumen expresada por la ecuación  $PV^n$  es constante y  $n > 0$ . Esta compresión se sigue en las unidades de proceso grandes en donde la capacidad de refrigeración es limitada. Implica poco enfriamiento.

La **compresión isentrópica** no implica enfriamiento y se realiza de forma adiabática y no presenta irreversibilidades (fricción). En la sección 5.2.1.1 se amplía este concepto.

Los **compresores rotatorios de desplazamiento positivo** pueden utilizarse para presiones de descarga del orden de 6 atm. La mayor parte de los compresores que operan con presiones de descarga superiores a 3 atm son máquinas alternativas de desplazamiento positivo. (2)

Seleccione la pestaña Convergence y escoja en Valid phases la opción Vapor-Only. Click .

Finalmente, al presionar Next, sale un cuadro de diálogo llamado "Required Input Complete", léalo y oprima Aceptar para correr la simulación. Una vez terminada la simulación le saldrá al final del Panel de Control (Control Panel) una línea que dice "->Simulation calculations completed ..." la cual le indica que la simulación ha sido completada.


Para observar los resultados presione el botón  que se encuentra en la barra de herramientas. En el Summary se muestra cómo fue terminada la simulación, si esta no presentó errores debe decir allí "Calculations were completed normally". Si la simulación presenta errores, éstos le serán notificados en el panel de control.

Observe en el Data Browser (como se muestra en la siguiente figura) las opciones de las que dispone para ver los resultados. En B1 encontrará los resultados referentes al compresor y en Results Summary encontrará un resumen de los datos de entrada y resultados de los cálculos referentes a las corrientes de entrada y salida del compresor.

En Results Summary → Streams puede encontrar valores termodinámicos de las corrientes tales como entropía, entalpía, densidad, etc. además de las condiciones de salida de la corriente (Presión, temperatura, fracción de vapor, etc.)

Summary		Balance	Parameters	Performance	Utility Usage
Compr results					
Compressor model:	Isentropic Compressor				
Phase calculations:	Vapor phase calculation				
Indicated horsepower:				Watt	
Brake horsepower:				Watt	
Net work required:				Watt	
Power loss:				Watt	
Efficiency:					
Mechanical efficiency:					
Outlet pressure:				N/sqm	
Outlet temperature:				K	
Isentropic outlet temperature:				K	
Vapor fraction:					

Al hacer click sobre la unidad de medida (por ejemplo Watt) es posible cambiar las unidades de este resultado (a MW, kW, hp, kcal/hr, etc.).



**¡ADVERTENCIA!**

Aspen muestra en los resultados para compresores el valor de la entrada de potencia con signo positivo y para turbinas el valor de la salida de potencia con signo negativo.

Esto no lo debe confundir ya que dentro de Aspen Plus el término de potencia es negativo, es decir:

$$-W_{\text{comp}} = 40 \text{ MW} \quad \text{y} \quad -W_{\text{turb}} = -40 \text{ MW}.$$

A continuación se realiza una breve explicación de algunos términos de la tabla de resultados para el compresor (Bloque B1) que se muestra en la figura anterior:

Indicated horse power: Es el cambio total de entalpía en la corriente.

Brake horsepower: potencia corregida con la eficiencia mecánica.

Isentropic outlet temperature: Temperatura a la cual la corriente de salida del compresor tiene la misma entropía que la corriente de entrada, (a la presión de succión y temperatura de entrada).

### 5.2.1.1. Sistemas Isentrópicos y eficiencia adiabática de compresores

La entropía es una medida del desorden molecular o aleatoriedad molecular. En un sistema desordenado las moléculas son menos predecibles y por tanto aumenta la entropía.

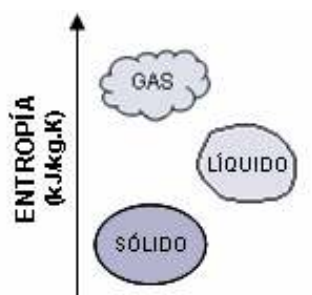


Figura 4. Nivel de desorden molecular

En Física la entropía es la magnitud termodinámica que mide la parte de la energía que no puede utilizarse para producir un trabajo y se define mediante la siguiente ecuación:

$$\partial S = \frac{\partial Q}{T} \quad (5.2)$$



El modo de Aspen Plus: **Property Analysis** para componente puro que se trató en la **sección 4**, posee esta propiedad (**S** y **DS**). Estudie la variación de la entropía con la temperatura (S vs. T y DS vs. T) para varias fases. Para esto, siga los pasos 1 a 9 descritos en la anterior sección.

Un proceso adiabático que es además reversible se conoce como *proceso isentrópico* (Entropía constante,  $\Delta S=0$ ). Las turbinas, compresores, entre otros sistemas, son adiabáticos y se desempeñan mejor cuando se minimizan las irreversibilidades tales como la fricción. Es importante entonces hacer un acercamiento a los procesos isentrópicos ya que permiten definir eficiencias para

los procesos y de este modo comparar un proceso real con uno a condiciones ideales.

Según lo anterior, la *eficiencia adiabática de compresores*,  $n$  se define como:

$$\eta = \frac{\text{trabajo isentrópico del compresor}}{\text{trabajo real del compresor}}$$

Para ampliar este tema diríjase al capítulo 6: “Entropía” del libro “Termodinámica” de Çengel et al. (Referencia 1)

### Pregunta de análisis 5.2

*Resuelva en Aspen Plus:*

Para el sistema de la Pregunta de análisis 5.1 resuelva los casos 1 a 3 planteados a continuación utilizando en todos el modelo de compresión politrópica.

Caso 1. Utilice la temperatura de salida obtenida en la pregunta de análisis anterior.

Caso 2. Realice el mismo análisis para una temperatura de salida de 600 K.

Caso 3. Utilice una eficiencia politrópica del 90%.

Con la ayuda del simulador, responda para cada caso las siguientes preguntas:

a) ¿Cuál es la entrada de potencia?

Caso 1: \_\_\_\_\_

Caso 2: \_\_\_\_\_

Caso 3: \_\_\_\_\_

b) ¿Cuál es la eficiencia del compresor?

Caso 1: \_\_\_\_\_

Caso 2: \_\_\_\_\_

c) ¿Cuál es la temperatura de salida?

Caso 3: \_\_\_\_\_

d) ¿Cuál es el cambio en la entropía?

Caso 1: \_\_\_\_\_

Caso 2: \_\_\_\_\_

Caso 3: \_\_\_\_\_

¿Qué puede concluir del análisis anterior? Dé al menos 3 conclusiones.

---

---

---

---

---

---

Para realizar en Aspen Plus el análisis de los dos primeros casos, siga los siguientes pasos:

Realice el mismo procedimiento de la Pregunta de análisis 5.1 con excepción en el momento de escoger el modelo del compresor. Seleccione allí el tipo Polytropic using ASME method. A continuación, en Calculations Options, seleccione la opción Specify discharge temperature and calculate efficiency e ingrese la temperatura de salida del compresor. Por último, en Convergence escoja la opción Vapor-Only.

Para el análisis del último caso basta con ingresar la eficiencia politrópica en la pestaña Specifications para el compresor. Tenga en cuenta que este valor no lo podrá ingresar si está seleccionada la opción Specify discharge temperature and calculate efficiency ubicada en la pestaña: Calculations Options.

---

### 5.2.2. Turbinas

Se denomina turbina al motor rotativo que convierte en energía mecánica la energía de un fluido (líquido o gas). La turbina consta de una rueda o rotor que tiene unido al alrededor de su circunferencia palas, hélices, cuchillas o cubos, de tal forma que el fluido en movimiento produce una fuerza tangencial que impulsa la rueda y la hace girar. Esta energía mecánica se transfiere a través de un eje para proporcionar el movimiento de una máquina, un compresor, un generador eléctrico o una hélice. El trabajo realizado en una turbina es positivo puesto que lo realiza el fluido.

Las turbinas se clasifican en turbinas hidráulicas o de agua, turbinas de vapor y turbinas de combustión. Hoy la mayor parte de la energía eléctrica mundial se produce utilizando generadores movidos por turbinas. Los molinos de viento que producen energía eléctrica se llaman turbinas de viento. (3)

Tipos de Turbinas:

- Turbinas Hidráulicas
- Turbinas de Vapor

- Turbinas Eólicas
- Turbinas de Combustión

### Pregunta de análisis 5.3

*Resuelva en Aspen Plus:*

Ingresa vapor de agua sobrecalentado a una turbina adiabática a 5 MPa y 400 °C, y sale como vapor saturado a una presión de 200 kPa. El flujo másico del vapor es 10 kg/s. Considere una eficiencia adiabática del 75%.

Determine la salida de potencia (en MW) \_\_\_\_\_

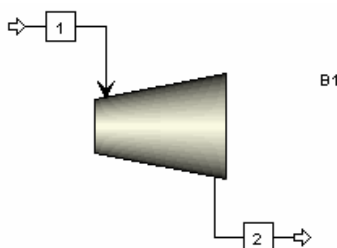
¿Cuál es la temperatura de salida del vapor? \_\_\_\_\_

¿Cuál es el cambio en la entropía? \_\_\_\_\_

¿Cuál es el cambio en la entalpía? \_\_\_\_\_

Para realizar este análisis en Aspen Plus, siga los siguientes pasos:

Siga el procedimiento de la Pregunta de análisis 5.1 con excepción en el momento de escoger el dispositivo en el Model Library en donde debe seleccionar de la pestaña Pressure Changers: Compr el que se encuentra en la parte inferior derecha. Continúe el procedimiento y seleccione igualmente el modelo isentrópico (adiabático y reversible) y en Convergence escoja la opción Vapor-Liquid.



Para encontrar los valores de entropía y entalpía diríjase en Results a la carpeta Results Summary → Streams.

### 5.3. EJERCICIOS PROPUESTOS

Resuelva las preguntas de análisis 5.1 y 5.2 para los siguientes sistemas:

- |               |   |   |
|---------------|---|---|
| 1) Nitrógeno: | $T_1 = 25\text{ °C}$<br>$P_1 = 1\text{ atm}$    | $P_2 = 5\text{ atm}$<br>$m\text{ (Flujo másico)} = 2.8\text{ kgmol/hr}$ |
| 2) Helio:     | $T_1 = 50\text{ °F}$<br>$P_1 = 14\text{ psia}$  | $P_2 = 70\text{ psia}$<br>$m\text{ (Flujo másico)} = 93\text{ lbmol/h}$ |
| 3) Aire:      | $T_1 = 86\text{ °F}$<br>$P_1 = 8.89\text{ psi}$ | $P_2 = 60\text{ psia}$<br>$m\text{ (Flujo másico)} = 2700\text{ lb/h}$  |

Sugerencia: Ver ANEXO 2 ¿Cómo adicionar o eliminar componentes?

### 5.4. BIBLIOGRAFÍA Y CIBERGRAFÍA

1. ÇENGEL, Y. BOLES, M. Termodinámica. Tomo I. Segunda Edición. Editorial Mc Graw Hill. México. 1996.

2. MCCABE. Warren L, et al. Operaciones unitarias en ingeniería química. Cuarta edición. Editorial McGraw Hill. Madrid. 1991

3. Bombas, compresores y turbinas

<http://html.rincondelvago.com/bombas-compresores-y-turbinas.html>

Fecha de consulta: Julio de 2006



## 6. MÁQUINAS TÉRMICAS, CICLOS DE REFRIGERACIÓN Y BOMBAS DE CALOR

### 6.1. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Apoyar la comprensión de algunos conceptos relacionados con la segunda ley de la termodinámica, a través ejercicios de aplicación resueltos en ASPEN PLUS®.
- Analizar el comportamiento de algunos ciclos utilizados comúnmente, termodinámica como lo son Las máquinas térmicas, ciclos de refrigeración y bombas de calor a través del cálculo de la eficiencia térmica y coeficientes de operación.

### 6.2. ALGUNOS CONCEPTOS FUNDAMENTALES Y SU APLICACIÓN EN ASPEN PLUS

La segunda ley de la termodinámica afirma que los procesos suceden en cierta dirección y que la energía tiene calidad así como cantidad. Este concepto se asocia con el funcionamiento de máquinas térmicas, ciclos de refrigeración y bombas térmicas.

A continuación se desarrolla la guía práctica para la simulación de diferentes ciclos asociados a la segunda ley de la termodinámica mediante el uso del simulador ASPEN PLUS®.

#### 6.2.1. Depósitos de energía térmica

Un depósito es un cuerpo hipotético con una capacidad de energía térmica (masa \* calor específico) grande que pueda suministrar o absorber cantidades finitas de calor, sin que sufra ningún cambio de temperatura como los océanos, ríos, lagos o la atmósfera.

Cualquier cuerpo físico cuya capacidad de energía térmica sea grande respecto de la cantidad de energía que suministra o absorbe puede modelarse como un depósito.

Tenemos entonces dos clases de depósitos:

- ✓ Fuente: Depósito que suministra energía en forma de calor.
- ✓ Sumidero: Depósito que absorbe energía en forma de calor.

#### 6.2.2. Máquina Térmica

El trabajo es convertible en calor directa y completamente, pero convertir el calor a trabajo requiere el uso de un dispositivo especial llamado: *Máquina térmica*.

Las máquinas térmicas tienen las siguientes características:

- ✓ Reciben calor de una fuente de alta temperatura (Energía solar, hornos, reactores nucleares)
- ✓ Convierten parte de este calor en trabajo (normalmente en forma de un eje de rotación)
- ✓ Liberan el calor de desecho remanente en un sumidero de baja temperatura (la atmósfera, ríos, océanos)
- ✓ Operan en un ciclo.

El dispositivo productor de trabajo que mejor se ajusta a la definición de máquina térmica es la *Central Eléctrica de Vapor*, que es una máquina de combustión externa (Ver Figura 5), donde el fluido de trabajo (vapor de agua) regresa periódicamente a su estado original. En esta planta, el ciclo (en su forma más sencilla) tiene las siguientes etapas:

1. El agua líquida a temperatura cercana a la del medio ambiente se bombea hacia una caldera a alta presión.
2. La transferencia del calor de un combustible (calor de combustión de un combustible fósil o calor de una reacción nuclear) se da de la caldera al agua, convirtiéndola en vapor de agua a alta temperatura a la presión de la caldera.
3. Se presenta una transferencia de energía, como trabajo de eje, del vapor a los alrededores, mediante un dispositivo tal como una turbina, en la cual el vapor se expande.
4. El vapor que queda en la turbina se condensa a temperatura y presión bajas mediante la transferencia de calor al agua de enfriamiento, completando de esta manera el ciclo.

Las características fundamentales de los ciclos de todas las máquinas térmicas son la absorción de calor a altas temperaturas, el rechazo de éste a una temperatura baja y la producción de trabajo. (1)

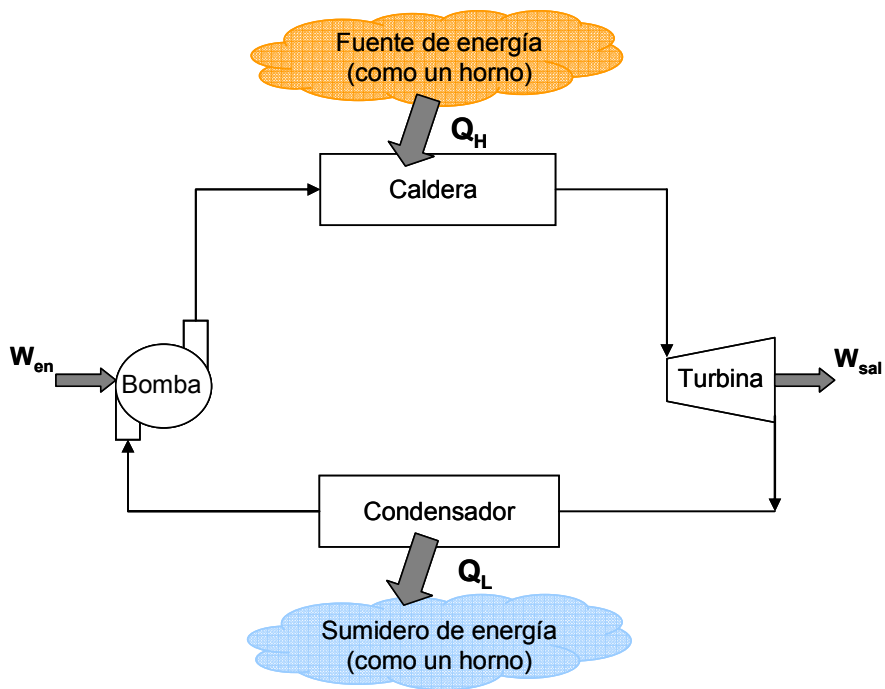


Figura 5. Central eléctrica de vapor

Donde:

$Q_L$  = Magnitud de la transferencia de calor entre un dispositivo cíclico y un medio de baja temperatura a temperatura  $T_L$

$Q_H$  = Magnitud de la transferencia de calor entre un dispositivo cíclico y un medio de alta temperatura a temperatura  $T_H$

$W_{en}$  = Cantidad de trabajo requerido para comprimir el agua a la P de la caldera.

$W_{sal}$  = Cantidad de trabajo entregado por el vapor cuando éste se expande en la turbina.

Es importante recordar que la producción de trabajo mediante un sistema es considerado un efecto positivo y deseado, y el consumo de trabajo un efecto negativo indeseable. Un sistema puede incluir más de una forma de trabajo durante un proceso. Cuando se habla de trabajo neto se refiere a la diferencia entre todo el trabajo que el sistema genera y todo el trabajo que consume como se muestra en la ecuación 6.1.

$$W_{neto} = \text{trabajo neto hecho en todas las formas} = \sum W_{sal} - \sum W_{en} \quad (6.1)$$

### 6.2.2.1. EFICIENCIA TÉRMICA

La salida de trabajo neto de una central eléctrica es sencillamente la diferencia entre la salida de trabajo total de la planta y la entrada de trabajo total, como se muestra en la ecuación 6.2.

$$W_{\text{neto,sal}} = W_{\text{sal}} - W_{\text{en}} \quad (6.2)$$

El trabajo neto de salida de una máquina térmica también puede determinarse a partir de los datos de transferencia de calor como se muestra en la ecuación 6.3. Recuerde que para un sistema cerrado que se somete a un ciclo, el cambio en la energía interna  $\Delta U$  es cero.

$$W_{\text{neto,sal}} = Q_H - Q_L \quad (6.3)$$

La fracción de la entrada de calor que se convierte en la salida de trabajo neta es una medida del rendimiento de una máquina térmica y recibe el nombre de eficiencia térmica  $\eta_t$ . Esta eficiencia mide el desempeño que tiene una máquina térmica al convertir el calor que recibe en trabajo.

El rendimiento o eficiencia en general, puede expresarse en términos de la salida y de la entrada requerida. En las máquinas térmicas la salida deseada es la salida de trabajo neta, y la entrada requerida es la cantidad de calor suministrada al fluido de trabajo. La eficiencia térmica de una máquina de este tipo puede expresarse así:

$$\text{Eficiencia térmica} = \frac{\text{Salida de trabajo neto}}{\text{Entrada de trabajo neto}} \quad (6.4)$$

$$\eta_t = \frac{W_{\text{net,sal}}}{Q_H} \quad (6.5)$$

O también si reemplazamos la ecuación 6.3. Tenemos:

$$\eta_t = 1 - \frac{Q_L}{Q_H} \quad (6.6)$$

### Pregunta de análisis 6.1

*Para la central eléctrica de vapor descrita a continuación, resuelva en Aspen Plus las preguntas de acuerdo a los resultados de la simulación*

Una central eléctrica de vapor, idéntica a la descrita en la Figura 5 trabaja a las siguientes condiciones:

En la caldera se produce vapor de agua a 1MPa con un flujo de 2000 kg/h, el vapor entra a la turbina donde produce un trabajo equivalente a 300 kW. Luego

de pasar por el condensador todo el fluido sale en estado líquido y es llevado a una bomba donde aumenta la presión de la corriente a 1MPa para volver a la caldera.

1) Reporte los siguientes datos:

$$\dot{Q}_H = \underline{\hspace{2cm}} \text{ kW}$$

$$W_{en} = \underline{\hspace{2cm}} \text{ kW}$$

$$\dot{Q}_L = \underline{\hspace{2cm}} \text{ kW}$$

$$W_{sal} = \underline{\hspace{2cm}} \text{ kW}$$

2) Calcule el trabajo neto de salida de las dos formas descritas (ecuación 6.2 y 6.3)

$$W_{neto,sal} = \underline{\hspace{2cm}} \text{ kW}$$

3) Calcule la eficiencia térmica utilizando la ecuación 6.4.

$$\eta_t = \underline{\hspace{2cm}}$$

Para resolver este problema siga los siguientes pasos en ASPEN PLUS®

1. Ingrese al ambiente de ASPEN (realice los pasos 1 a 3 de la sección 3.1)

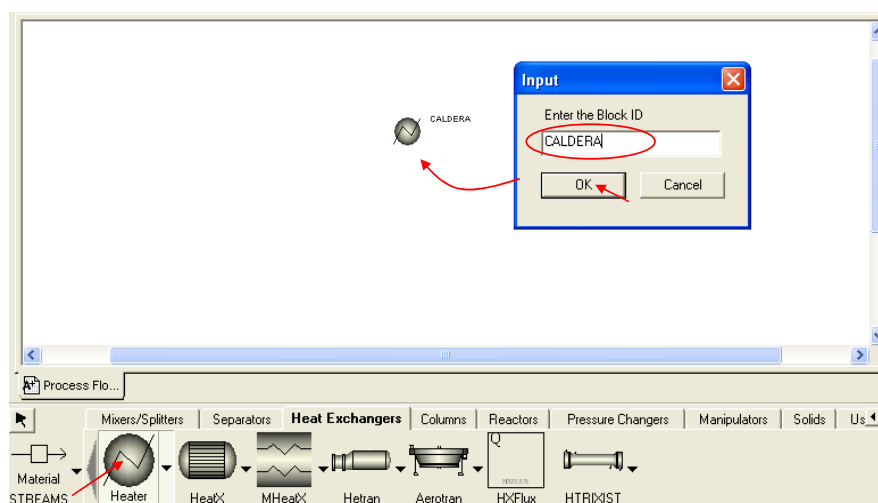
2. Cuando se encuentre en la ventana principal llamada Process Flowsheet Window, asegúrese de que tenga disponible el Model Library (Paleta de unidades de proceso: equipos y dispositivos de ingeniería), si no está visible presione F10.

En el Model Library encontrará en cada pestaña, clasificados por categorías, los diferentes equipos para construir el diagrama de flujo que se quiere simular.

Para conocer más acerca de cómo construir diagramas de flujos en Aspen Plus remítase al ANEXO 4.

3. Para dibujar el diagrama descrito en la Figura 5 busque en la pestaña heat exchangers el equipo cuyo modelo se llama heater. Selecciónelo y en el espacio en blanco haga click.

Dependiendo de la configuración del simulador, puede que inmediatamente aparezca un cuadro de diálogo que le indica que debe asignarle un nombre al equipo. Escriba allí CALDERA. Si este cuadro no aparece una vez ingresa el equipo dé CTRL + M sobre el nombre de este asignado por defecto (comúnmente B1) y cambie el nombre por CALDERA.

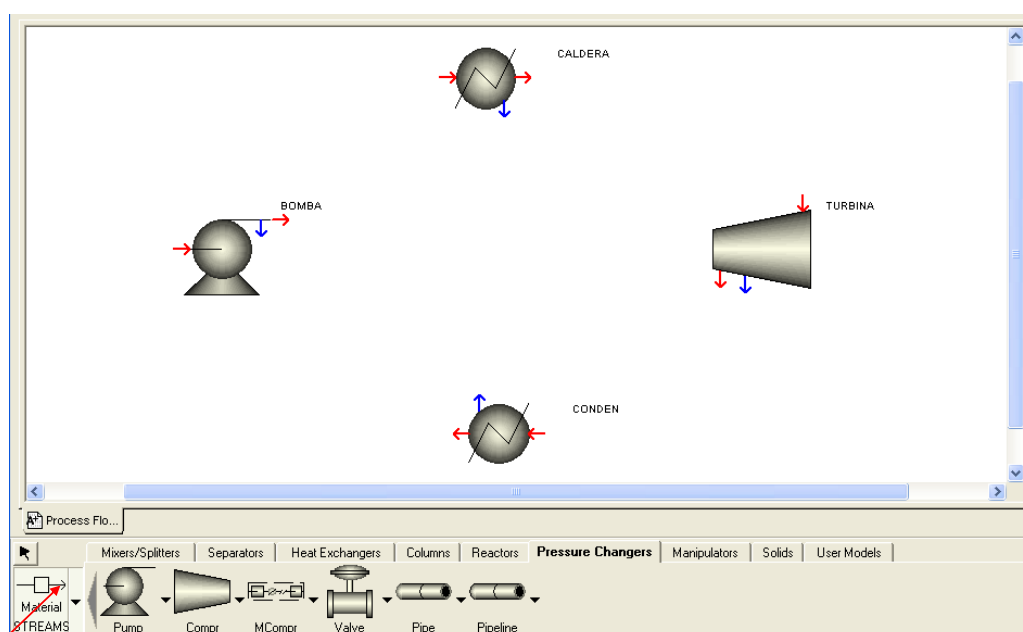


Luego busque la pestaña llamada *Pressure changers* y seleccione el equipo con el modelo llamado *compr*. Asígnele el nombre TURBINA.

Vuelva a la pestaña de *heat exchangers* y escoja el equipo cuyo modelo se llama *heater*. Nómbrelo como CONDEN.

En la pestaña *Pressure changers* y seleccione el equipo con el modelo llamado *pump*. Escriba el nombre BOMBA.

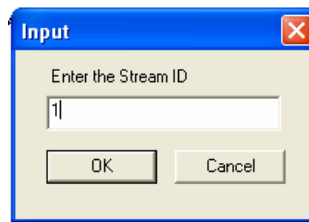
4. Hasta este punto usted ya tiene seleccionado los equipos que va a simular. A continuación se deben dibujar las corrientes del proceso. En la esquina inferior izquierda seleccione el botón *STREAMS*. Lleve el cursor hasta el espacio en blanco donde está realizando el diagrama.



Inmediatamente se activarán unas flechas rojas y azules en cada equipo. Las flechas rojas señalan las entradas y salidas que se deben especificar, las azules indican algunas corrientes opcionales.

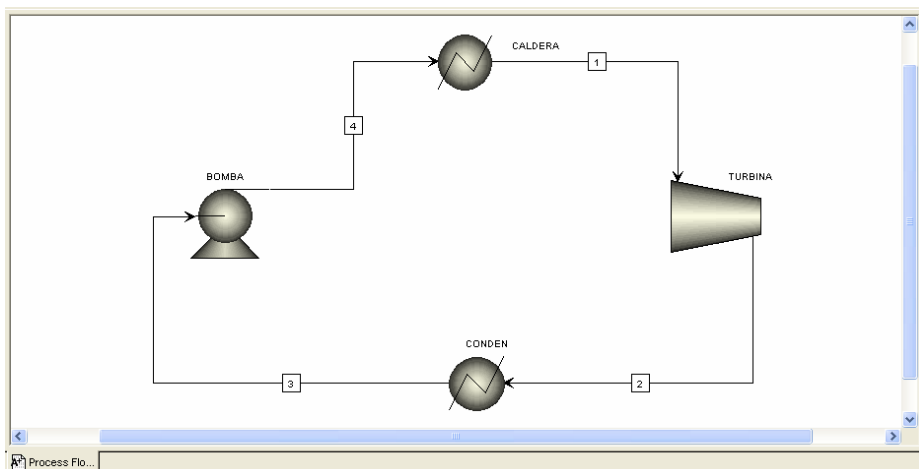
5. Una con una corriente la salida del equipo CALDERA con la entrada del equipo TURBINA.

Es posible que el simulador le pida que le asigne un nombre a la corriente. Escriba el número 1. De lo contrario, Aspen asigna un número por defecto. Si desea cambiar el nombre, basta con dar CTRL + M sobre el nombre de esta.

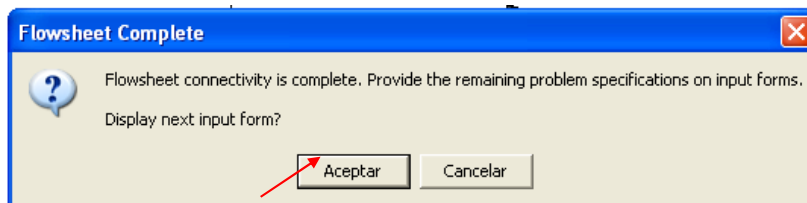


Repitiendo el paso anterior sucesivamente termine de dibujar y nombrar las corrientes del proceso.

Click 



6. Acepte el cuadro de texto que aparece, éste le informa que el diagrama y las conexiones se encuentran completas.



7. Al aceptar se abre la ventana del Data Browser. En la primera ventana setup ingrese, si desea, el título de la simulación. Click **N>**

The screenshot shows the 'Global' tab of the Data Browser. The 'Title' field contains 'PREGUNTA DE ANÁLISIS 6,1'. Under 'Units of measurement', both 'Input data' and 'Output results' are set to 'SI'. Under 'Global settings', 'Run type' is 'Flowsheet', 'Input mode' is 'Steady-State', 'Stream class' is 'CONVEN', 'Flow basis' is 'Mole', 'Ambient pressure' is '14,69595 psi', 'Ambient temp.' is '50 F', 'Valid phases' is empty, and 'Free water' is 'No'.

8. Presione Find e ingrese el componente a simular: Agua. Después de escoger el compuesto deseado oprima Add y luego Close. Click **N>**

9. En Base method, escoja el paquete de propiedades termodinámicas NRTL (NonRandom, Two-Liquid) para generar las propiedades del equilibrio líquido–vapor. Click **N>**

The screenshot shows the 'Flowsheet Sections' tab. Under 'Property methods & models', 'Process type' is 'ALL', 'Base method' is 'NRTL', and 'Henry components' is empty. Under 'Petroleum calculation options', 'Free-water method' is 'STEAM-TA' and 'Water solubility' is '3'. Under 'Electrolyte calculation options', 'Chemistry ID' is empty and the 'Use true-components' checkbox is checked. On the right, 'Property method' is 'NRTL', 'Modify property models' is unchecked, 'Vapor EDS' is 'ESIG', 'Data set' is '1', 'Liquid gamma' is 'GMRENON', 'Data set' is '1', 'Liquid enthalpy' is 'HLMX86', and 'Liquid volume' is 'VLMX01'. Checkboxes for 'Heat of mixing', 'Poynting correction', and 'Use liq. reference-state enthalpy' are also visible.

10. Luego de dar nuevamente click en Next, aparece un cuadro de diálogo. Haga click en Cancelar.

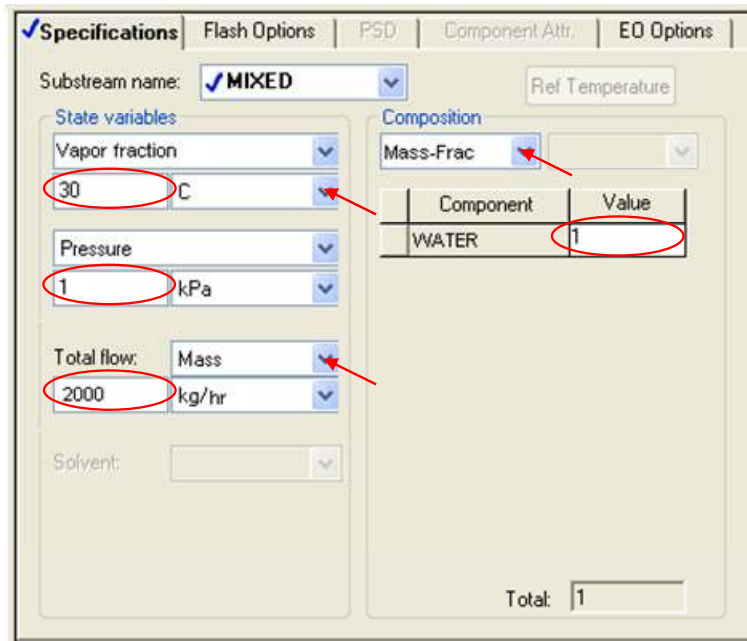


11. En el panel izquierdo busque la carpeta Streams y despléguela. Para especificar la corriente 1 seleccione la carpeta.

De acuerdo al planteamiento del problema, la corriente 1 se puede especificar así:

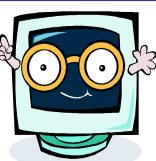
Presión	1 MPa
Vapor fraccion	1
Total Flow	2000 kg/h
Mass-frac (water)	1

En State variables busque Pressure e ingrese 1 MPa y en la otra casilla busque Vapor fraccion e ingrese 1. Cuando especifique el flujo, verifique que se encuentre en Mass, seleccione Mass-frac para la composición e ingrese 1 para el agua (100% Agua).



12. En el panel izquierdo busque la carpeta Blocks y seleccione la subcarpeta CALDERA. En Flash specification busque vapor fracción = 1 y pressure = 0





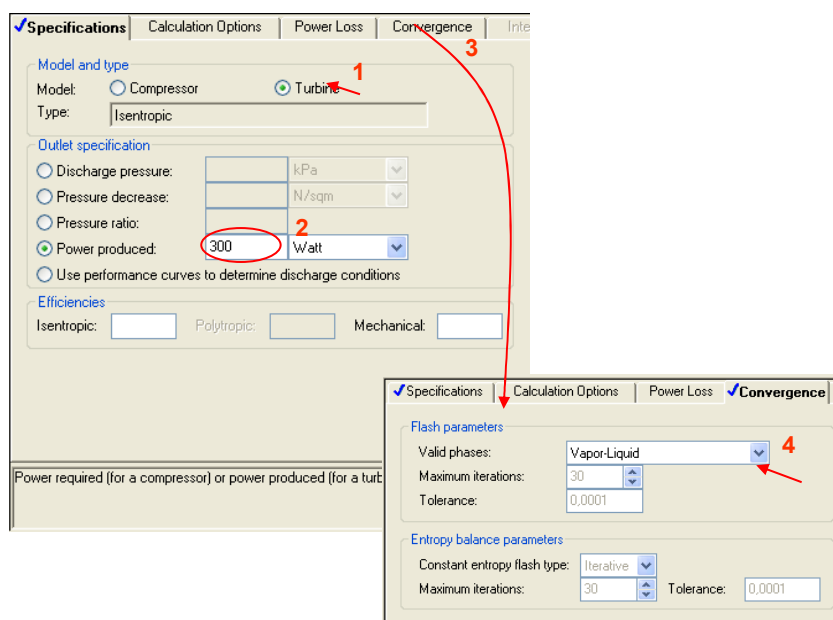
Cuando esté especificando en el simulador un equipo como un intercambiador de calor, uno de los grados de libertad disponibles es la presión. Tenga en cuenta la manera en que ASPEN PLUS recibe la información:

SIGNIFICADO	ENTRADA A ASPEN
Si se quiere indicar que no hay caída de presión ( $\Delta P=0$ )	0
Si se quiere indicar que hay una caída de presión, se debe anotar la cantidad numérica con signo negativo. Ejemplo:-3 KPa	Valor < 0
Si se quiere indicar que después de pasar por el equipo la corriente de salida tiene un aumento de presión, entonces se debe anotar la cantidad numérica con signo positivo. Ejemplo :1.5 KPa	Valor > 0

13. Seleccione el siguiente equipo: TURBINA.

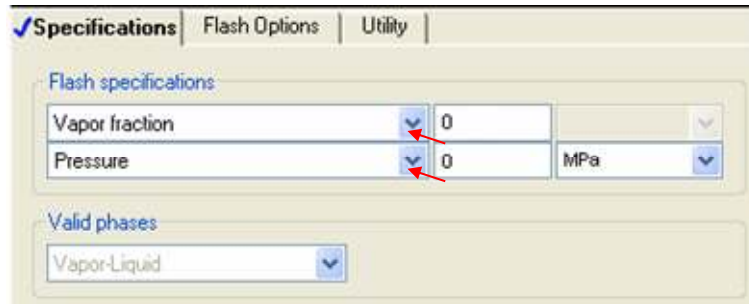
En Model seleccione Turbine y seleccione Power produced y escriba 300 kW

Seleccione la pestaña Convergence y en valid fases seleccione Vapor-liquid



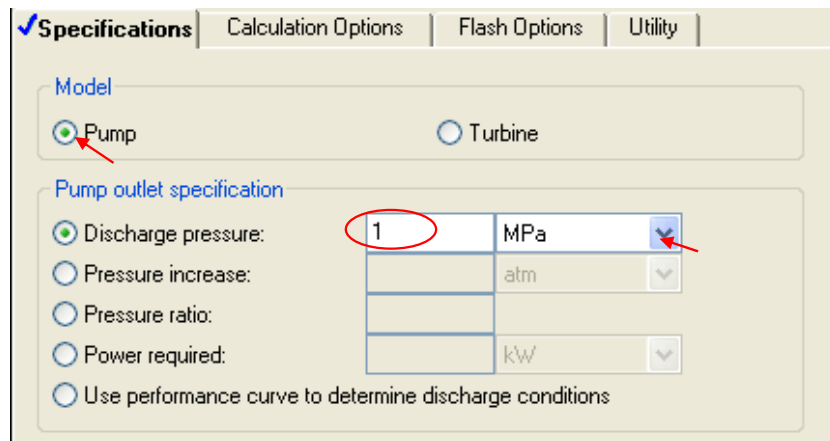
14. En el panel izquierdo busque Conden y selecciónelo.

En Flash specification busque vapor fracción = 0 y pressure= 0 ( $\Delta P= 0$ ).

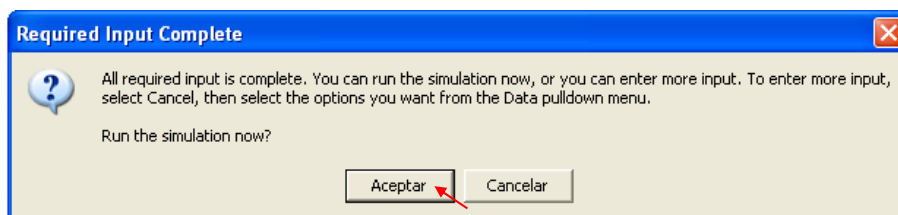



15. En el panel izquierdo seleccione Bomba.

En seleccione Discharge pressure y escriba 1MPa. Click 



16. Aparecerá un cuadro de diálogo indicándole que el simulador tiene todos los datos necesarios para realizar los cálculos. Presione en aceptar.



17. Cuando ASPEN le indique que los cálculos están completos. Presione  para ver los resultados.

En la ventana de resultados busque en el panel izquierdo la carpeta *Blocks*, allí encontrará los resultados de los cálculos para cada equipo.

Para poder conocer el valor de  $Q_H$  y  $Q_L$ , en el panel izquierdo seleccione CALDERA. Lea el valor de net duty que representa  $Q_H$ , igualmente seleccione COND y lea net duty que representa  $Q_L$ .

The screenshot shows the 'Blocks' tree on the left with 'CALDERA' selected. The 'Summary' panel on the right displays the following data:

Parameter	Value	Unit
Outlet temperature:	179,977607	K
Outlet pressure:	10	bar
Vapor fraction:	1	
Heat duty:	1479,29067	kW
Net duty:	1479,29067	kW
1st liquid / Total liquid:		
Pressure-drop correlation parameter:	0	

Para leer el trabajo requerido por la bomba, seleccione el equipo y lea el valor en Net Work required.

Cuando lea el trabajo que la turbina entrega en Net Work required, recuerde que este valor es negativo por que ASPEN lo toma de esa manera cuando se trata de Turbinas, por lo tanto para los cálculos estos valores debe tomarlos como positivos.



**NOTA:** Tenga en cuenta que tanto  $Q_L$  y  $Q_H$  son definidas como magnitudes y por ello son cantidades positivas.

No se deje confundir por los signos que el simulador presenta en sus resultados. Cuando en el condensador el simulador presenta un net duty negativo, esta indicando que esta realizando un enfriamiento.

### 6.2.3. Refrigeradores y bombas de calor

El calor fluye de las regiones de alta temperatura a las de baja. Dicho proceso de transferencia de calor sucede en la naturaleza sin que se requiera algún dispositivo. El proceso inverso, sin embargo, no sucede por si solo. La transferencia de calor de una región de baja temperatura a una de alta temperatura requiere dispositivos especiales llamados refrigeradores.

Los refrigeradores son dispositivos cíclicos y los fluidos de refrigeración se llaman refrigerantes.

Otro dispositivo que transfiere calor de un medio de baja temperatura a uno de alta temperatura es la bomba de calor. Los refrigeradores y las bombas de calor son, en esencia, los mismos dispositivos; sólo difieren en sus objetivos.

El refrigerador mantiene el espacio refrigerado en una temperatura baja y extrae el calor de él. La descarga de este calor en un medio de temperatura mayor es una parte necesaria de la operación, no el propósito.

El objetivo de la bomba de calor, sin embargo, es mantener un espacio calentado a alta temperatura. Esto se logra al absorber calor de una fuente de baja temperatura, como el agua de un pozo o el aire exterior frío en el invierno, y al suministrar este calor a un medio más caliente, como una casa.

En la Figura 6 se muestra en forma esquemática un refrigerador y una bomba de calor.

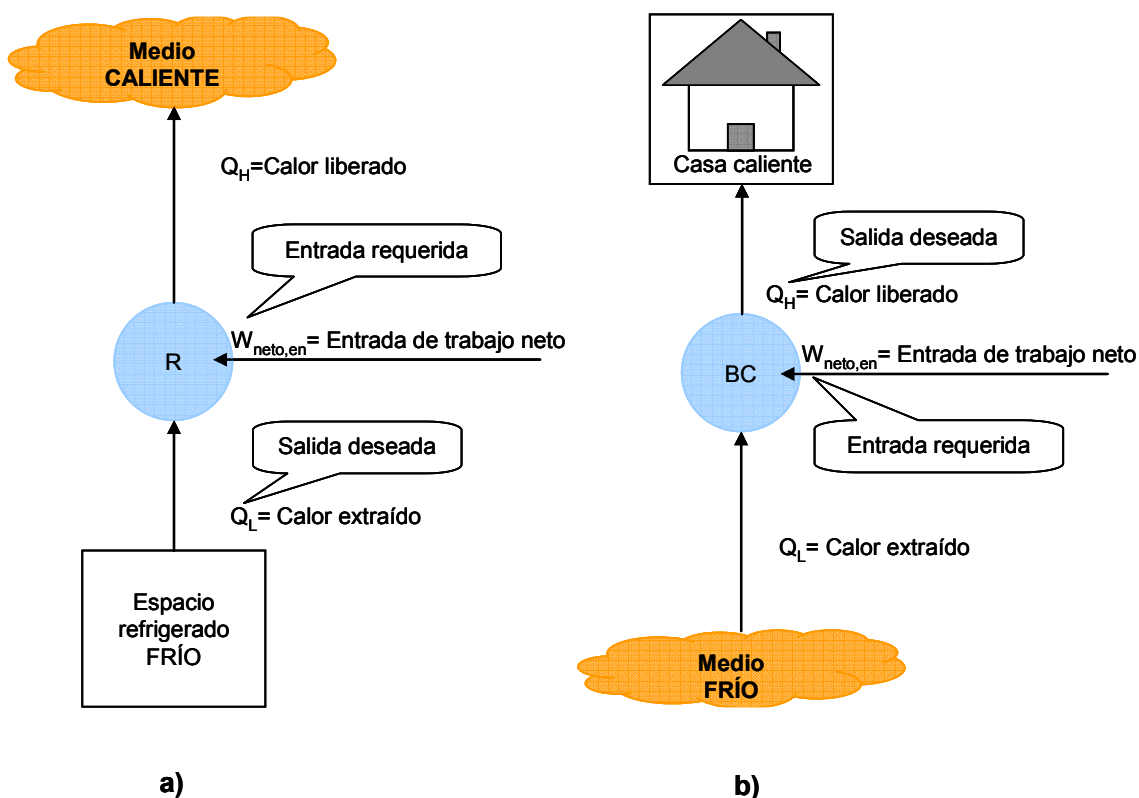


Figura 6. Diagrama esquemático de a) Refrigerador, b) Bomba de Calor

Donde:

$Q_L$  = Magnitud del calor extraído del espacio refrigerado a la temperatura  $T_L$ .

$Q_H$  = Magnitud del calor liberado hacia el espacio caliente a temperatura  $T_H$ .

$W_{\text{neto,en}}$  = Entrada de trabajo neto al refrigerador o a la bomba de calor

### 6.2.3.1. COEFICIENTE DE OPERACIÓN

El rendimiento de refrigeradores y bombas de calor se expresa en términos del Coeficiente de operación (COP), el cual se define de la siguiente forma:

Para refrigeradores:

$$\text{COP}_R = \frac{\text{salida deseada}}{\text{entrada requerida}} = \frac{\text{efecto de enfriamiento}}{\text{entrada de trabajo}} = \frac{Q_L}{W_{\text{neto,en}}}$$

Para bombas de calor:

$$\text{COP}_{BC} = \frac{\text{salida deseada}}{\text{entrada requerida}} = \frac{\text{efecto de calentamiento}}{\text{entrada de trabajo}} = \frac{Q_H}{W_{\text{neto,en}}}$$

Como el trabajo neto de entrada se puede expresar así:  $W_{\text{neto,en}} = Q_H - Q_L$

El coeficiente de operación también se puede expresar así:

Para refrigeradores:

$$\text{COP}_R = \frac{1}{\left(\frac{Q_H}{Q_L}\right) - 1} \quad (6.7)$$

Para bombas de calor:

$$\text{COP}_{BC} = \frac{1}{1 - \left(\frac{Q_L}{Q_H}\right)} \quad (6.8)$$

Comparando las ecuaciones 6.7 y 6.8 se tiene que para valores fijos de  $Q_L$  y  $Q_H$

$$\text{COP}_{BC} = \text{COP}_R + 1 \quad (6.9)$$



### SABÍAS QUE...

El aire acondicionado absorbe calor del cuarto que está enfriando y lo desecha al exterior. Esta misma unidad de acondicionamiento de aire funciona como una bomba de calor en el invierno, si se instalará al revés. Así la unidad tomará calor del exterior frío y lo meterá al cuarto.

Los sistemas de aire acondicionado que se equipan con los controles apropiados y la válvula de inversión, funcionan tanto para invierno y como para verano.

#### 6.2.4. Ciclo de refrigeración por compresión de vapor

El ciclo de refrigeración por compresión de vapor es el que más se emplea en refrigeradores, sistemas de acondicionamiento de aire y bombas de calor y se compone de cuatro procesos:

- 1-2 Compresión isentrópica en un compresor
- 2-3 Rechazo de calor a presión constante en un condensador
- 3-4 Estrangulamiento en un dispositivo de expansión
- 4-1 Absorción de calor a presión constante en un evaporador

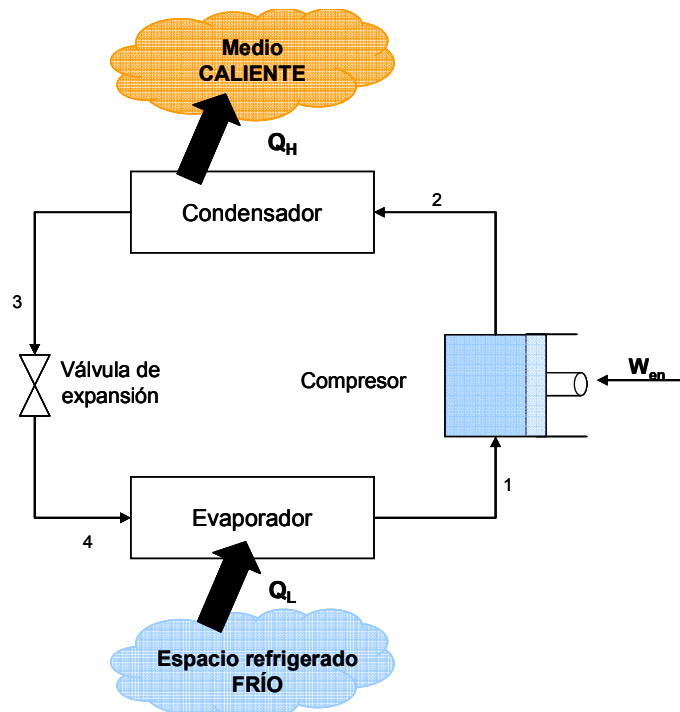


Figura 7. Diagrama esquemático para el ciclo de refrigeración

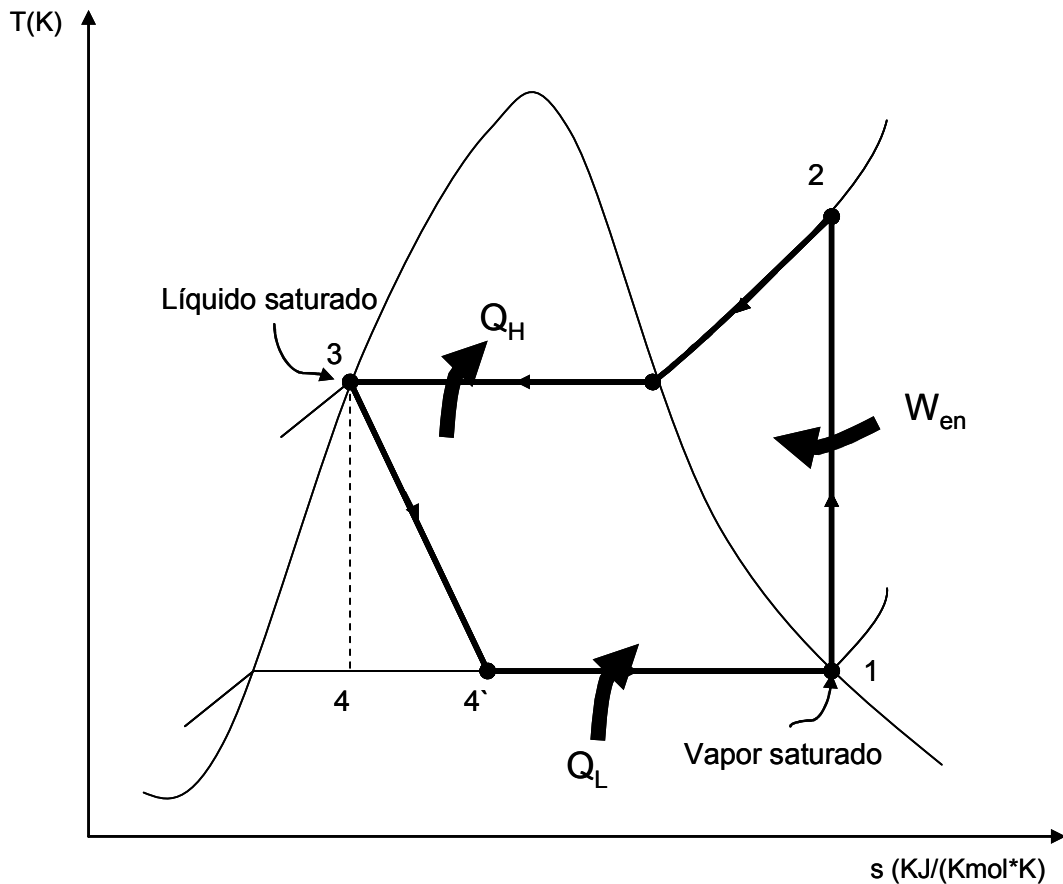
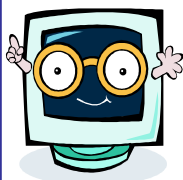


Figura 8. Diagrama T-s para el ciclo ideal de refrigeración por compresión de vapor

En este ciclo el refrigerante entra al compresor en el estado 1 como vapor saturado y se comprime isentrópicamente hasta la presión del condensador. Durante el proceso de compresión isentrópica la temperatura del refrigerante aumenta hasta un valor bastante superior al de la temperatura del medio circundante, como el aire atmosférico. Después el refrigerante entra en el condensador como vapor sobrecalentado en el estado 2 y sale como líquido 2 en el estado 3, como resultado de la liberación de calor a los alrededores.

El refrigerante líquido-saturado en el estado 3 se estrangula hasta la presión del evaporador al pasar por una válvula de expansión o por un tubo capilar. La temperatura del refrigerante desciende por debajo de la temperatura del espacio refrigerado durante este proceso. El refrigerante ingresa al evaporador en el estado 4 como una mezcla saturada de baja calidad, y se evapora por completo absorbiendo calor del espacio refrigerado. El refrigerante sale del evaporador como vapor saturado y vuelve a entrar al compresor, con lo cual completa el ciclo.





### RECUERDE...

El concepto de **calidad ( $x$ )**, indica la fracción de vapor de una mezcla saturada. Su valor siempre se encuentra entre 1 y 0. Cuando el sistema se encuentra como líquido saturado su valor es 0 y la calidad de un sistema que se encuentra como vapor saturado es 1.

Tenga en cuenta que ASPEN PLUS llama a esta propiedad **Vapor fraction** y es uno de los grados de libertad que se puede especificar para definir una corriente.

Un refrigerador doméstico trabaja por medio de este ciclo de refrigeración por compresión (Figura 9). El compartimiento del congelador, donde el calor es absorbido por el refrigerante, sirve como el evaporador. Los serpentines detrás del refrigerador, donde el calor se disipa en el aire de la cocina, sirven como el condensador.

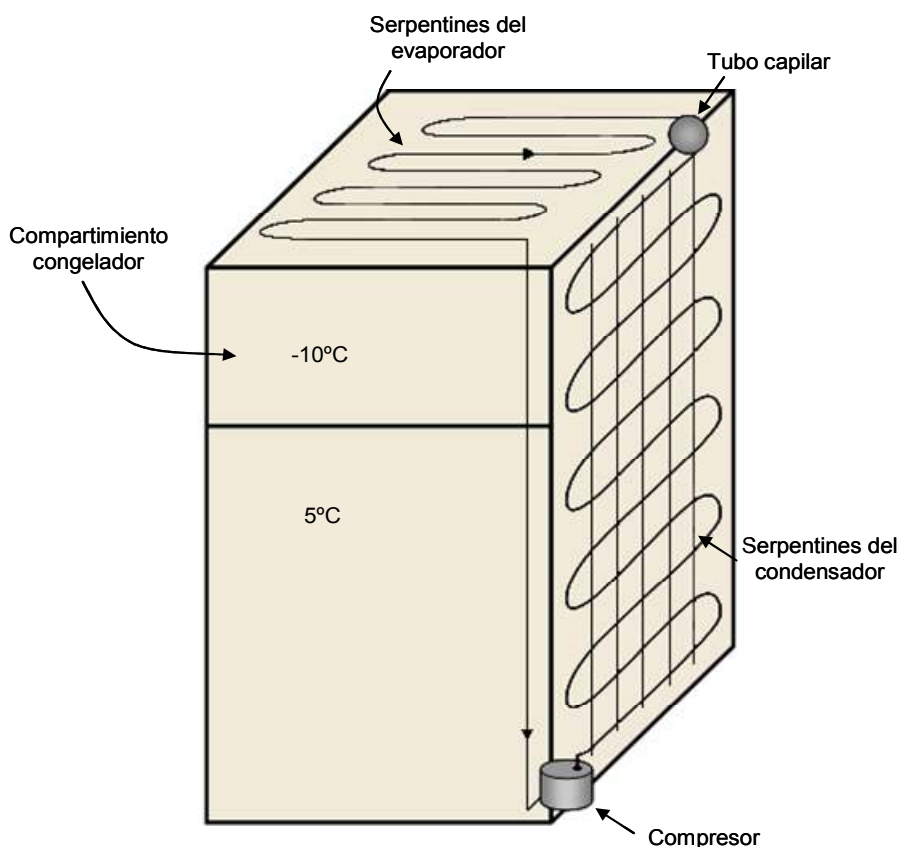


Figura 9. Esquema de un refrigerador doméstico



### SABÍAS QUE...

Los principales compuestos empleados en los sistemas de enfriamiento de los refrigeradores domésticos eran los CFCs (Cloroflurcarbonados) como el conocido refrigerante-12 (freón12).

Sin embargo, se ha descubierto que los CFC son una grave amenaza para el medio ambiente por su papel destructor de la capa de ozono. Según el Protocolo de Montreal, la fabricación de CFC debía finalizar al final de 1995. En reemplazo a los CFCs se están utilizando los hidroclorofluorocarbonos, HCFC, y el metilbromuro que no dañan la capa de ozono, pero producen gases de efecto invernadero. Los HCFC se retirarán en el 2015 y el consumo de metilbromuro se limitará progresivamente. La industria de la refrigeración debería adoptar rápidamente otros compuestos alternativos no perjudiciales, como el metilcloroformo.

En sustitución de los CFCs se usan principalmente dos gases:

- ✓ El R-134a ( $C_2H_2F_4$ )
- ✓ El R-600a (Isobutano).

(2)

### Pregunta de análisis 6.2

*Resuelva en Aspen Plus las preguntas de acuerdo a los resultados de la simulación*

El compartimiento principal de una nevera, que utiliza como refrigerante R134a ( $C_2H_2F_4$ ) a una tasa de 0.05 kg/s, es igual al esquema mostrado en la Figura 10 y mantiene el espacio refrigerado a 4°C. La temperatura de la cocina es de 25°C en donde se libera el calor a través del condensador.

El condensador trabaja a 665 kPa y el evaporador a 337.5 kPa. Considere que no hay caída de presión en estos equipos.

1) Encuentre cual es el calor liberado a la cocina ( $\dot{Q}_H$ ).

---

2) Encuentre el coeficiente de rendimiento del refrigerador ( $COP_R$ ). definido por la ecuación 6.7.

---

3) ¿Cual es el trabajo requerido por el compresor?

---

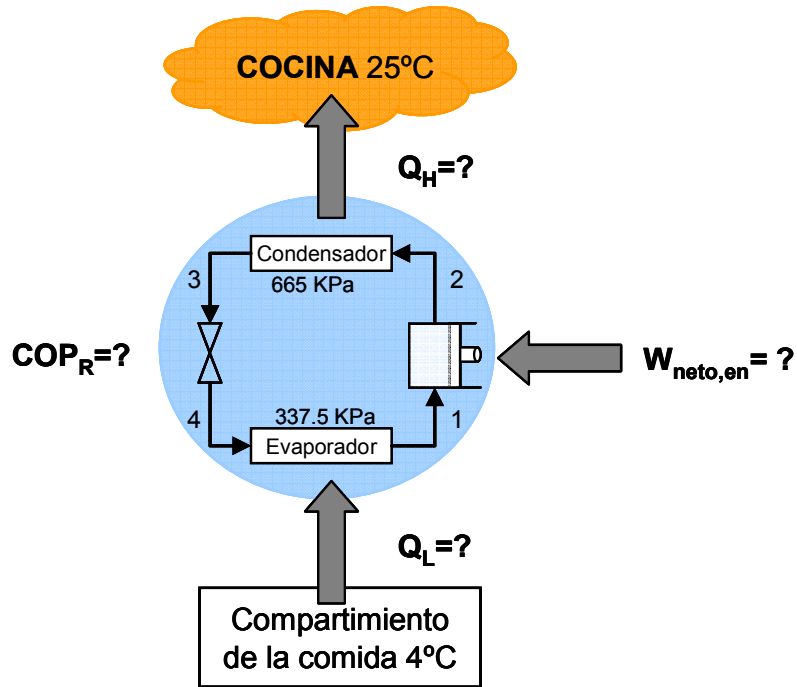
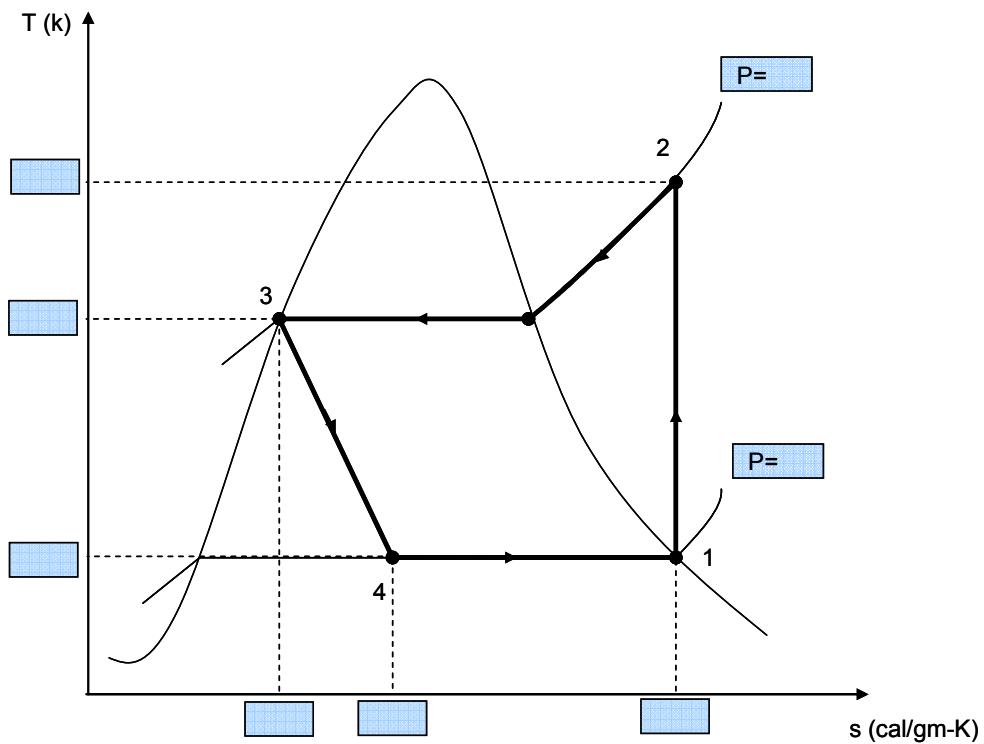


Figura 10. Esquema de un refrigerador para la pregunta 6.2

- 4) Con los datos de la tabla de corrientes que suministra el simulador complete en los recuadros la información faltante en el siguiente diagrama:



- 5) Para cada corriente escriba el estado en que se encuentra. Si se encuentra en una mezcla líquido vapor indique el porcentaje de vapor de la mezcla.

CORRIENTE	ESTADO
1	
2	
3	
4	

Para solucionar este problema en ASPEN PLUS siga el procedimiento presentado en la pregunta de análisis 6.1.

**Recuerde:** Cuando esté programando el compresor, busque la pestaña Convergence y seleccione en Valid phases Vapor Liquid.

Para contestar la pregunta 3) Y 4) Siga los siguientes pasos una vez la simulación esté completa:

Cuando se encuentre en la ventana de los datos generados, seleccione en el panel izquierdo la carpeta Result Summary y la subcarpeta Stream. En format seleccione Full. Desplácese a través de la tabla, y en ella encontrará todos los datos necesarios.

Streams  
Blocks  
Convergence  
Results Summary  
Run Status  
**Streams**  
Convergence  
Utilities

Material | Heat | Load | Work | Vol. % Curves | Wt. % Curves | Petro. Curves | Poly. Curves

Display: All streams | Format: FULL | Stream Table

	1	2	3	4
Substream: MIXED				
Mole Flow kmol/hr				
1,1,1-01	1,764161	1,764161	1,764161	1,764161
Total Flow kmol/hr	1,764161	1,764161	1,764161	1,764161
Total Flow kg/hr	180,0000	180,0000	180,0000	180,0000
Total Flow l/min	200,7508	111,7413	2,489643	36,96704
Temperature K	277,1511	303,9632	298,1511	277,1494
Pressure atm	3,330866	6,563040	6,563040	3,330866
Vapor Frac	1,000000	1,000000	0,0	,1745206
Liquid Frac	0,0	0,0	1,000000	,8254794

### Pregunta de análisis 6.3

Resuelva en Aspen Plus las siguientes preguntas de acuerdo a los resultados de la simulación

En una casa se tiene instalado un aire acondicionado para cubrir las necesidades de calefacción (Ver Figura 11). Un día de invierno la temperatura del aire exterior disminuye a  $-2^{\circ}\text{C}$  y se sabe que el compresor realiza un trabajo de 2kW.

Si la bomba de calor trabaja a las siguientes condiciones:

- ✓ Refrigerante: R-600a (Isobutane)
- ✓ Flujo másico de refrigerante: 0.05kg/s
- ✓ Presión del evaporador: 146.8 kPa
- ✓ Para el condensador y el evaporador considere  $\Delta P=0$

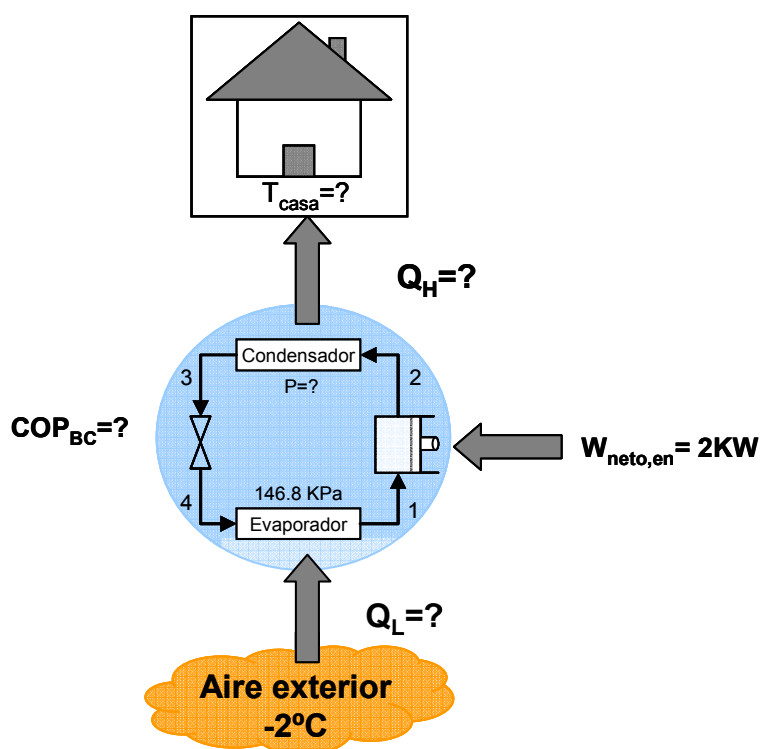


Figura 11. Esquema de una bomba de calor para la pregunta 3

1) ¿A qué temperatura la bomba de calor mantendrá la casa?

$T_{\text{casa}} = \underline{\hspace{10em}}$

2) ¿A qué presión trabaja el condensador de la bomba de calor?

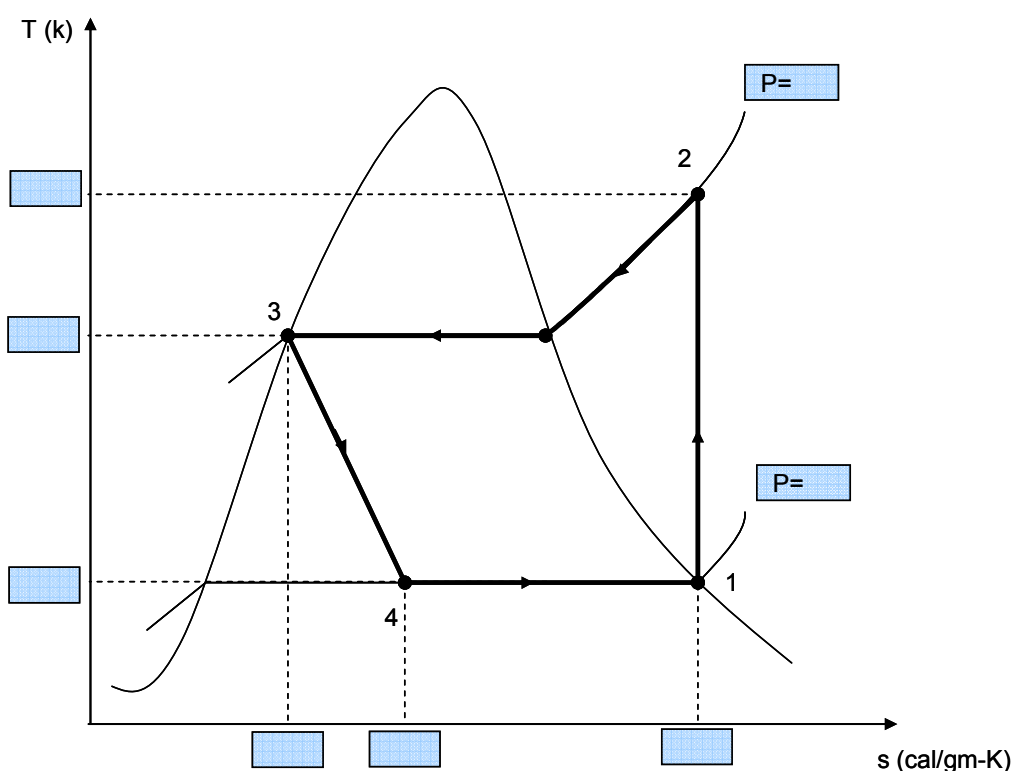
$$P_{\text{condensador}} = \underline{\hspace{10em}}$$

3) Encuentre el coeficiente de rendimiento de la bomba de calor ( $\text{COP}_{\text{BC}}$ ) definido por la ecuación 6.8.

\_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

4) Con los datos de la tabla de corrientes que suministra el simulador complete en los recuadros la información faltante en el siguiente diagrama:



5) Para cada corriente escriba el estado en que se encuentra. Si se encuentra en una mezcla líquido vapor indique el porcentaje de vapor de la mezcla.

CORRIENTE	ESTADO
1	
2	
3	
4	

Para solucionar este problema con la ayuda de ASPEN PLUS siga el procedimiento presentado en la pregunta de análisis 6.1.

---

(3) (4)

### 6.3. BIBLIOGRAFÍA Y CIBERGRAFÍA

---

1. SMITH, J.M. VAN NESS H.C. ABBOTT M.M. Introducción a la Termodinámica en Ingeniería química. Quinta edición. Editorial Mc Graw Hill. México. 1996

2. Las neveras

<http://cric.pangea.org/cast/articulos/neveras.html>

Fecha de consulta: Julio de 2006

3. ÇENGEL, Y. BOLES, M. Termodinámica. Tomo I y Tomo II. Segunda Edición. Editorial Mc Graw Hill. México. 1996.

4. Wikipedia. La enciclopedia libre

[http://es.wikipedia.org/wiki/Refrigeraci%C3%B3n\\_por\\_compresi%C3%B3n](http://es.wikipedia.org/wiki/Refrigeraci%C3%B3n_por_compresi%C3%B3n)

Fecha de consulta: Julio de 2006

## ANEXO 1. MODELOS TERMODINÁMICOS UTILIZADOS EN ESTA GUÍA

El paquete termodinámico es un conjunto de ecuaciones y modelos que le permite al simulador calcular diferentes propiedades de un sistema. Cada método termodinámico está diseñado para ciertos tipos de sistemas, componentes y condiciones, por tanto es importante conocer cuáles son los criterios de escogencia de cada uno de ellos, porque de esta decisión depende la confiabilidad de los datos que el simulador calcula.

En esta guía no se entrará en el detalle del manejo de las ecuaciones de cada modelo, sólo en los criterios de selección.

En la Tabla 1 se encuentra un listado de las características más importantes de los modelos termodinámicos aquí utilizados.

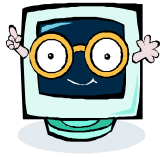
Tabla 1. Características más importantes de los modelos termodinámicos<sup>1</sup>

CARACTERÍSTICA	MODELO TERMODINÁMICO			
	NRTL	WILSON	UNIQUAC	UNIFAC
Modelo de coeficientes de actividad	X	X	X	X
Utiliza la ley de los gases ideales para modelar la fase vapor.	X	X	X	
Se debe trabajar a bajas presiones (menores de 10 bar)	X	X	X	
Rango de temperatura entre 20 y 150°C				X
Predice el equilibrio líquido-vapor	X	X	X	X
Predice el equilibrio líquido-líquido	X		X	X
Predice el comportamiento de soluciones líquidas no ideales	X	X	X	X
Se puede trabajar con componentes polares y no polares	X	X	X	X
No se puede trabajar con compuestos cerca de su temperatura crítica	X	X	X	X

Para profundizar en este tema se sugiere leer las ayudas al usuario que ASPEN PLUS® posee y libros de Termodinámica.

<sup>1</sup> Descripción adaptada de la ayuda al usuario proporcionada por ASPEN PLUS®





ASPEN PLUS® posee una ayuda muy buena para guiarte en la escogencia de los modelos termodinámicos según los componentes y sistema químico que posea.


Busca en la ventana donde se elige el modelo termodinámico este símbolo



y sigue las instrucciones que ASPEN indique.

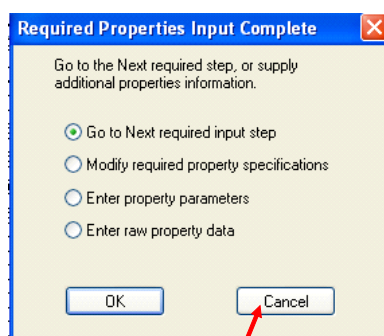
## ANEXO 2. ¿CÓMO ADICIONAR O ELIMINAR COMPONENTES?

### Agregar componentes

Si desea agregar más componentes, solo debe dar click en la primera pestaña inferior (o en ) que lo lleva de nuevo al Data Browser en donde por Components puede adicionarlos.

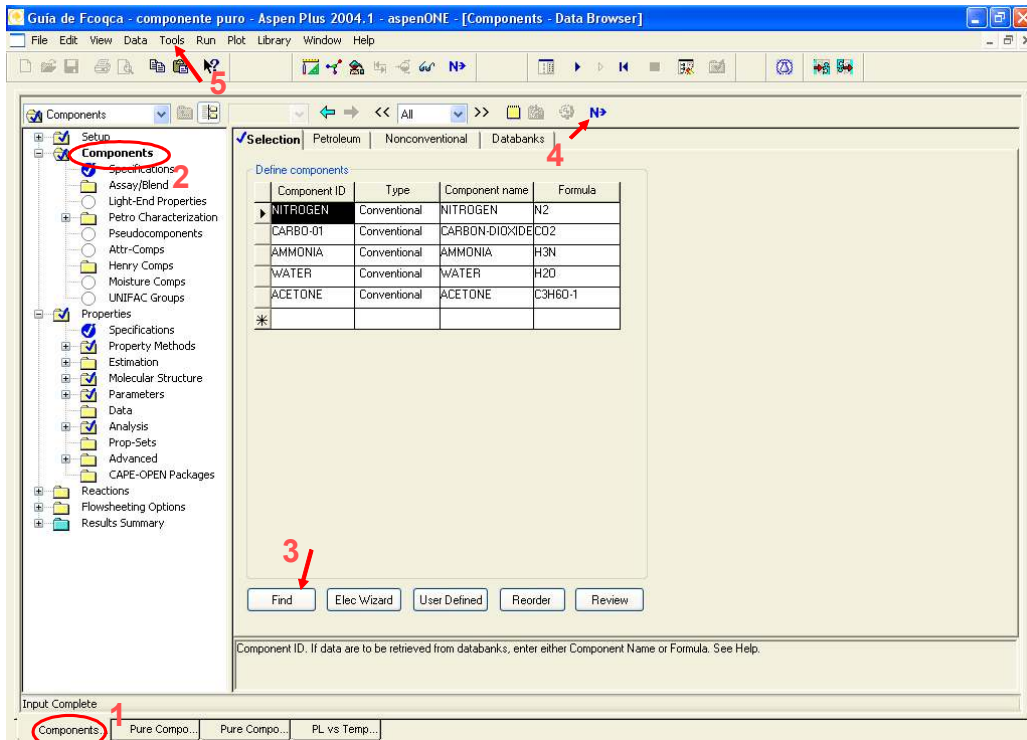
### Paso 1

- 1) Cierre la ventana “Pure Component Properties Analysis” y diríjase mediante la primera pestaña inferior al Data Browser.
- 2) Seleccione Components.
- 3) A continuación de click en Find para adicionar los componentes deseados.
- 4) Click en Next hasta aparecer el siguiente cuadro de diálogo:



Oprima Cancel.

- 5) Una vez realizada esta acción ingrese nuevamente al modo de Pure components: “Tools→Analysis→Property→Pure...”



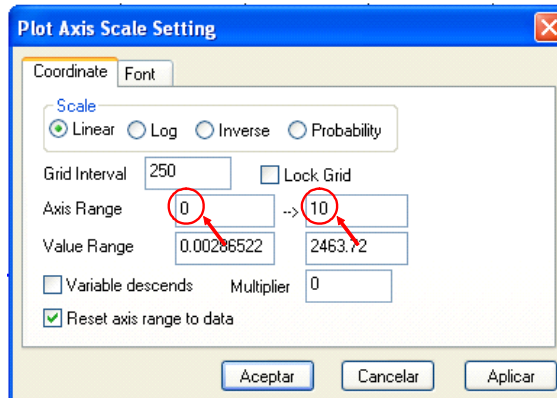
## Eliminar componentes

Para eliminar un componente, basta con seleccionar en el recuadro “Define components” la fila del componente que desea eliminar, dar click derecho y luego click en “Delete Row”.

### ANEXO 3. LECTURA DE GRÁFICOS

Para visualizar más fácilmente los gráficos y poder realizar lecturas de datos más precisas, modifique la escala de ambos ejes de la siguiente forma:

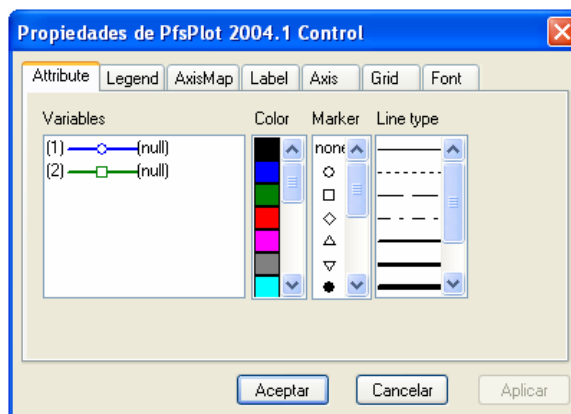
- i. Dé click derecho en cada eje y click en Edit...
- ii. En Axis Range introduzca el rango de valores que desea visualizar, por ejemplo:



- iii. Presione Aplicar y luego en Aceptar

Así mismo, puede modificar los colores de las líneas, el tipo, la forma de la flecha, etc., dando doble click en cada línea.

Otra forma de modificar los gráficos es dando click derecho en cualquier parte de la gráfica y luego click en Properties:



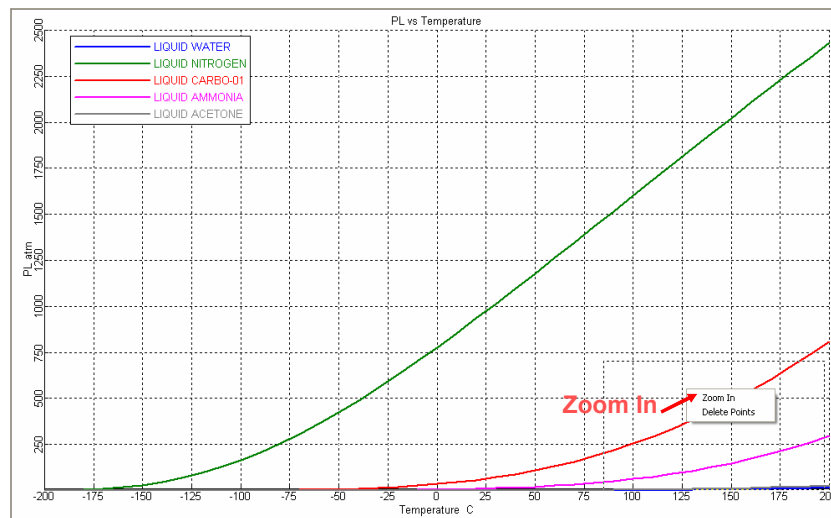
Explore las diferentes pestañas para personalizar las gráficas. En la pestaña Axis usted encontrará que puede modificar la escala de la gráfica.

## ZOOM

Otra forma de visualizar más fácilmente los puntos es realizando un zoom a alguna área específica del gráfico:

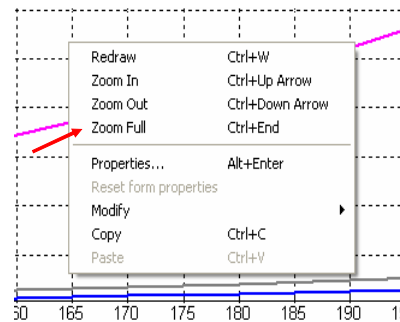
### Paso 1

Con el puntero del Mouse, dibuje el área de interés del gráfico presione el botón derecho del mouse. Luego de click en Zomm In.



### Paso 2

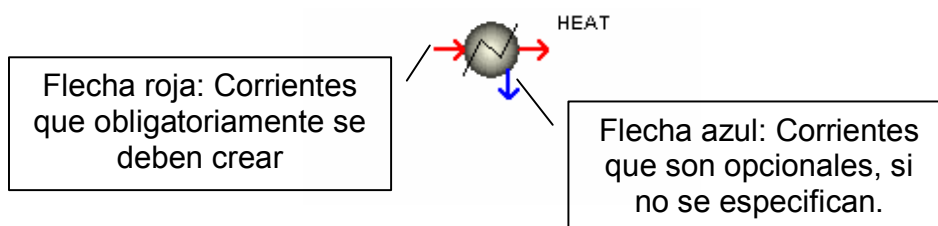
Para volver a la vista completa del gráfico, oprima el click derecho sobre cualquier punto del gráfico aumentado y luego dé click en Zoom Full. Si desea disminuir o aumentar un poco la imagen, de click en Zoom Out o Zoom In respectivamente.



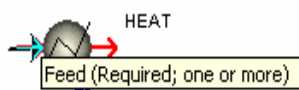
## ANEXO 4. CONSTRUCCIÓN DE DIAGRAMAS DE FLUJOS EN ASPEN PLUS®

La construcción de diagramas de flujo en ASPEN PLUS® es fácil, sólo se debe tener en cuenta algunas recomendaciones para que el diagrama quede bien y con todas las conexiones necesarias para la simulación:

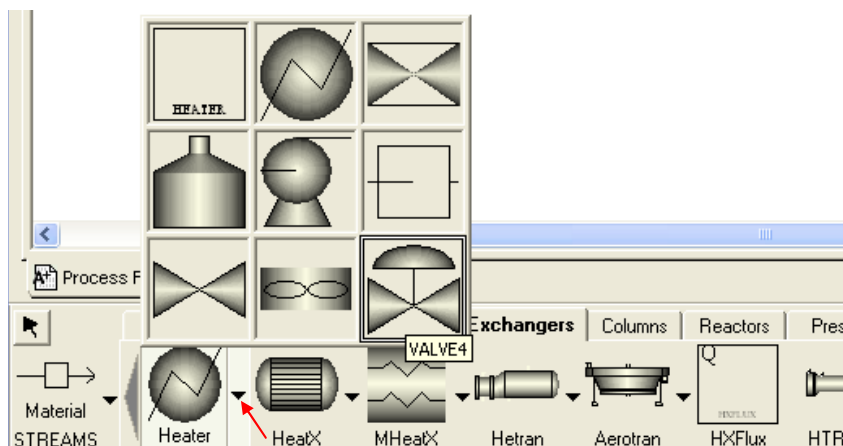
- ✓ Antes de conectar alguna corriente, verifique que se conecte en la flecha adecuada.



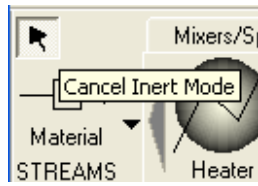
Además, si sitúa el cursor en las flechas, el simulador le indicará cada una de ellas a qué corresponde.



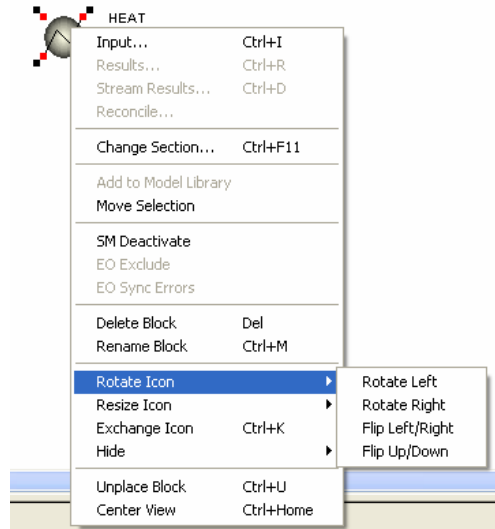
- ✓ Usted puede desplegar en cada ícono una lista para elegir la figura de su gusto.



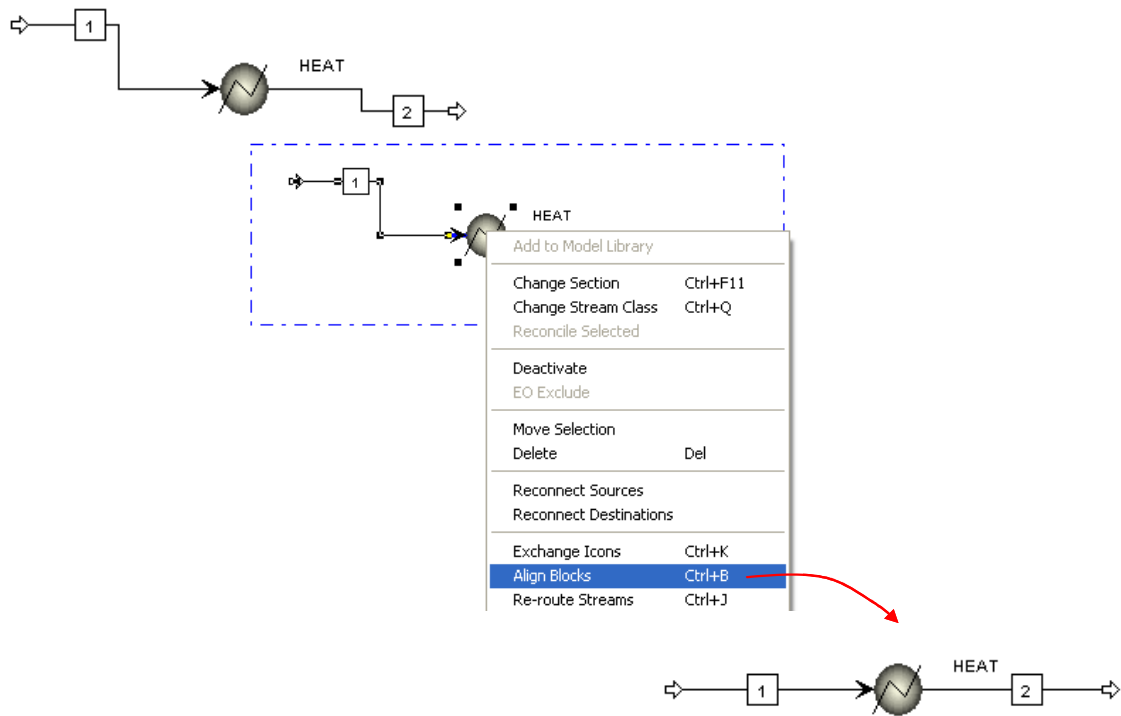
- ✓ Si desea reubicar algún bloque o corriente, asegúrese de que el cursor se encuentre como una flecha, de lo contrario oprima la flecha que se encuentra en el panel inferior izquierdo o presione ESC.



- ✓ Si desea girar o voltear un icono lo puede hacer dando click derecho sobre la figura, en Rotate Icon seleccione la opción requerida.



- ✓ Si las corrientes se encuentran desalineadas con respecto al equipo, Seleccione el grupo, y presione click derecho busque Align Blocks o puede realizarlo a través del teclado con Ctrl+B



- ✓ Si desea conectar una corriente a un equipo diferente, selecciónela y presione click derecho. Usted puede elegir Reconnect Source si desea cambiar una corriente de salida o Reconnect Destination si desea cambiar una corriente de entrada.



