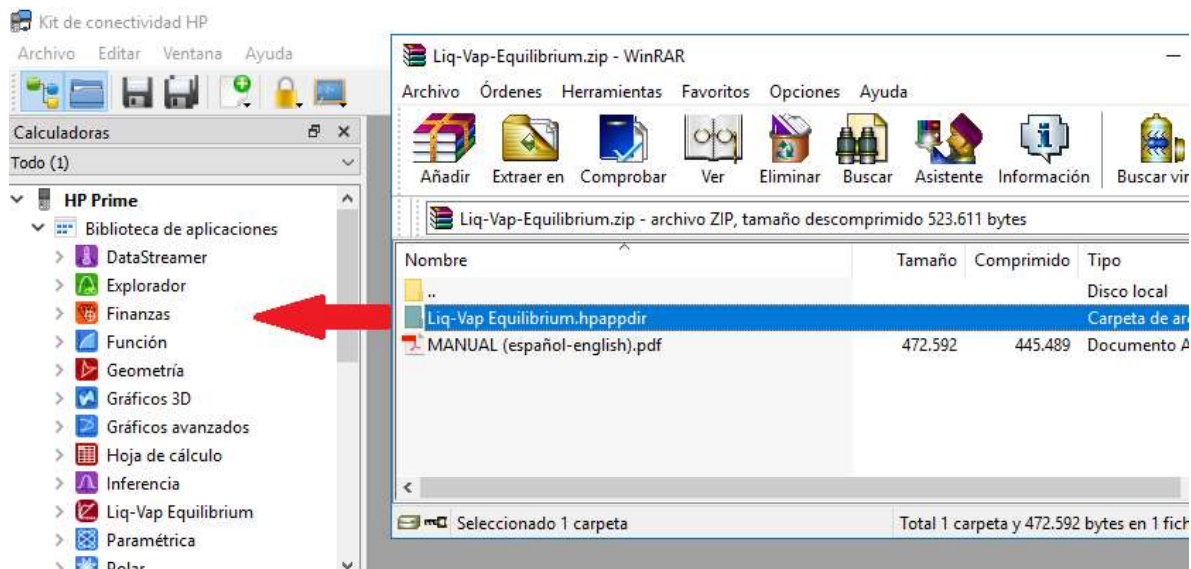


EQUILIBRIO DE FASES LIQUIDO – VAPOR (ESPAÑOL)

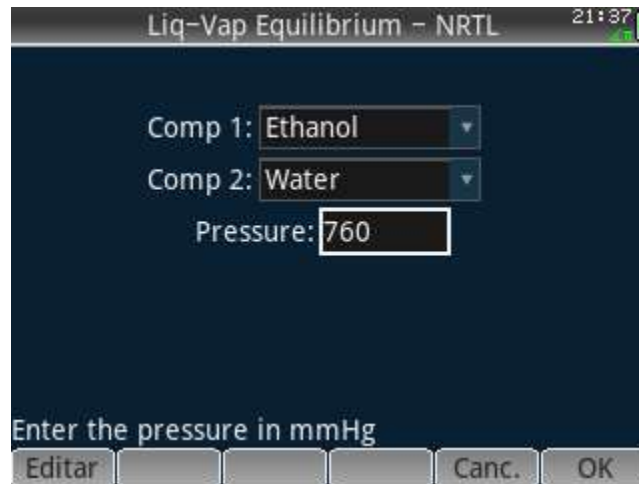
- 1) Una vez descargado, arrastrar la carpeta “Liq-Vap Equilibrium.hpappdir” y soltar en la carpeta en la calculadora.



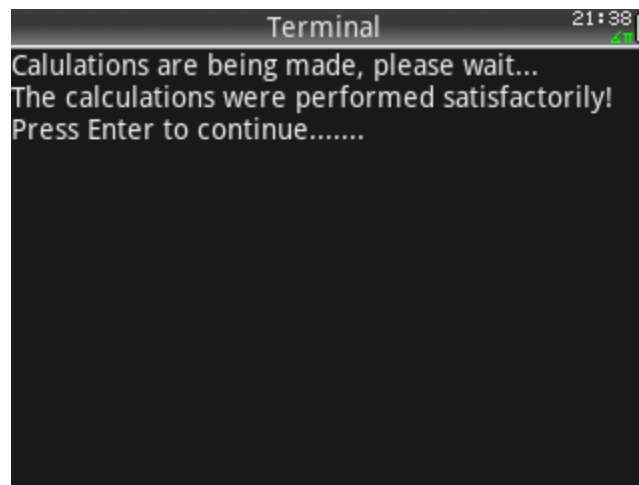
- 2) Verificar que aparezca el programa de este modo, de no ser así puede deberse a que no se realizó la instalación correctamente o que hubo un problema de diferencias de versiones de firmware.



- 3) Ingrese a la aplicación, seleccione los componentes a trabajar, presión de operación en mmHg y luego pulse OK. Por fines de ejemplo, se escogerán etanol y agua a una presión de 760 mmHg.



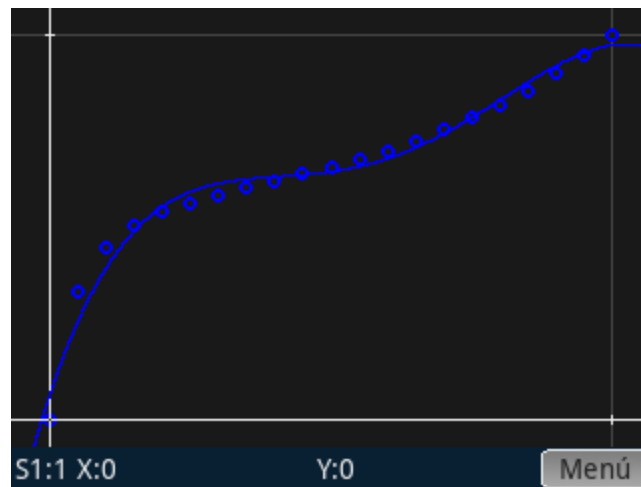
- 4) Espere a que los cálculos se completen, y luego pulse Enter.



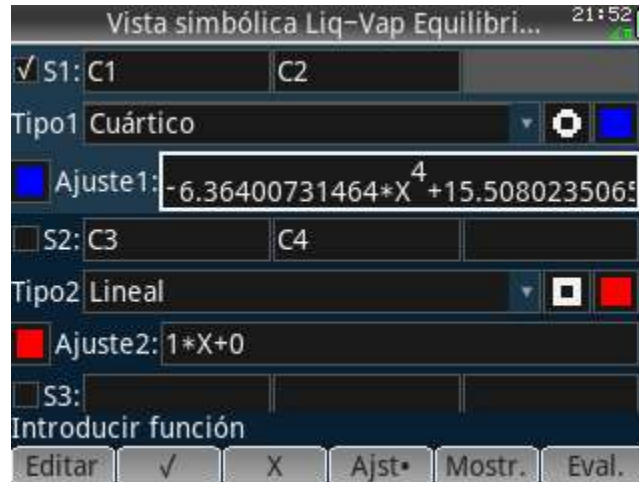
- 5) Usted vera en pantalla los resultados:
- a) La primera columna corresponde a la fracción molar "x" del primer compuesto en fase liquida.
 - b) La segunda columna corresponde a la fracción molar "y" del primer compuesto en fase vapor
 - c) La tercera columna corresponde a la temperatura en grados Kelvin
 - d) La cuarta columna corresponde a la entalpia de la fase liquida en kcal/kmol
 - e) La quinta columna corresponde a la entalpia de la fase vapor en kcal/kmol

Liq-Vap Equilibrium - NRTL					21:41
	x	y	T[K]	hliq[kcal/kn	
1	0	0	373.13780	1,321.2626	
2	0.05	0.3306688	363.42488	1,076.0994	
3	0.1	0.4459942	359.40874	942.92158	
4	0.15	0.5040796	357.31147	846.60090	
5	0.2	0.5395870	356.05740	766.18735	
6	0.25	0.5647651	355.22014	693.65153	
7	0.3	0.5849462	354.59666	625.39016	
8	0.35	0.6029946	354.09162	559.76668	
9	0.4	0.6205015	353.65475	495.96256	
10	0.45	0.6384564	353.26125	433.56648	
0					
Editar Más Ir a Ir → Canc. OK					

- 6) Al presionar OK, podrá ver la gráfica “x” vs “y”, la cual es la más útil de las gráficas de equilibrio liquido – vapor, ya que con esta se puede determinar el número de platos de una columna de destilación por medio del método grafico de McCabe-Thiele.



- 7) Si presiona la tecla “Symb” podrá observar la curva polinómica de cuarto orden que se ajusta a los datos de “x” vs “y”.



SOBRE EL METODO DE CALCULO

El éxito o fracaso de la destilación, depende fundamentalmente de los datos de equilibrio del sistema, razón por la cual es necesario buscar mecanismos que permitan establecer dicho equilibrio con un alto grado de certeza.

Nuestra aplicación en HP prime, ofrece el cálculo de los datos de equilibrio real mediante el método de los coeficientes de actividad mediante la relación: NRTL.

Si bien existen relaciones como: Van Laar, UNIQUAC, Chao Seeder, etc; uno de los más utilizados es el método NRTL cuya fórmula para calcular el coeficiente de actividad del componente "i" es:

$$\ln(\gamma_i) = \frac{\sum_j^N \tau_{ji} \cdot G_{ji} \cdot x_j}{\sum_j^N G_{ji} \cdot x_j} + \sum_j^N \frac{x_j \cdot G_{ij}}{\sum_k^N G_{kj} \cdot x_k} \left[\tau_{ij} - \frac{\sum_k^N \tau_{kj} G_{kj} \cdot x_k}{\sum_k^N G_{kj} \cdot x_k} \right]$$

Según la definición de constante de equilibrio tenemos:

$$k_i = \frac{y_i}{x_i}$$

Y la constante de equilibrio para soluciones reales es:

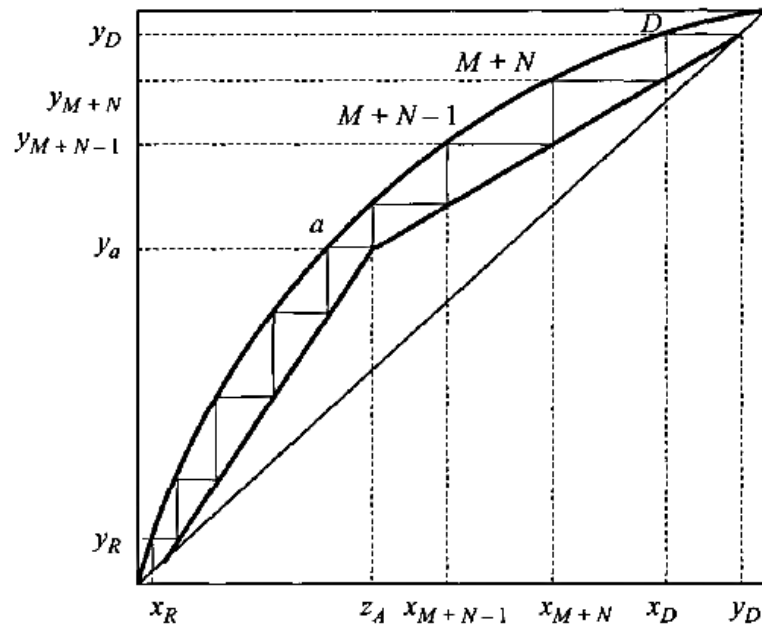
$$k_i = \gamma_i \cdot k_i^o$$

Donde k_i^o es la constante de equilibrio ideal, en nuestro caso calculado gracias a la ecuación de Antoine.

$$k_i^o = \frac{Pv_i}{P_{operation}} \quad \ln(Pv_i) = A - \frac{B}{T_i + C}$$

Para el cálculo del número de platos teóricos se poseen varios métodos, entre los que más destacan son:

a) McCabe-Thiele



b) Ponchon-Savarit

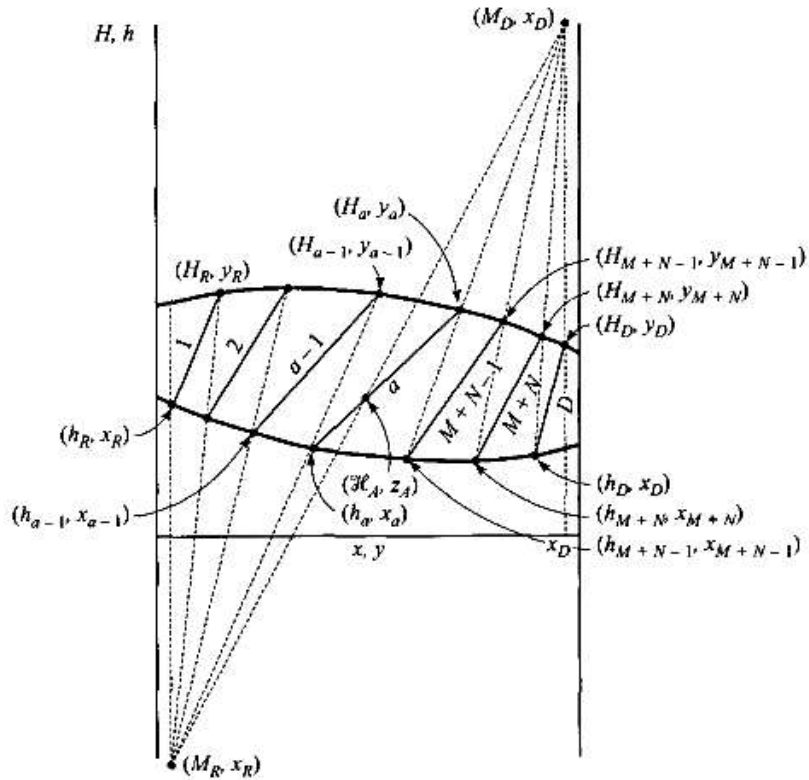
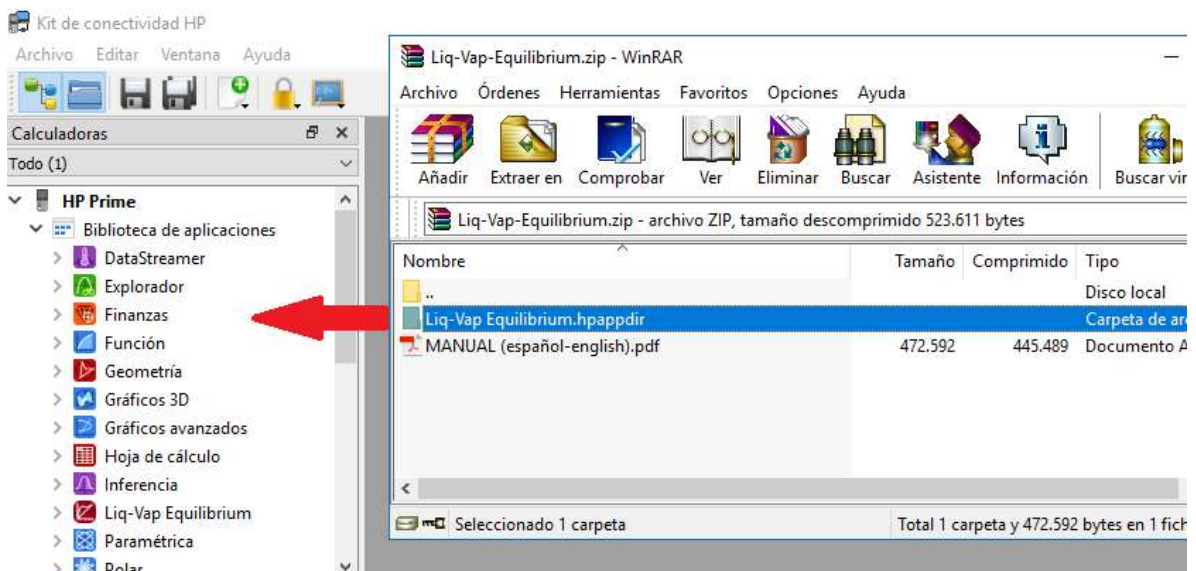


Figura 14.9. Representación gráfica en diagrama entalpía específica-concentración utilizada para la determinación del número de etapas o pisos teóricos por el método de Ponchon y Savarit, de una columna de rectificación convencional de mezclas binaria, con caldera, condensador parcial y piso de alimentación.

LIQUID-VAPOR PHASE EQUILIBRIA (ENGLISH)

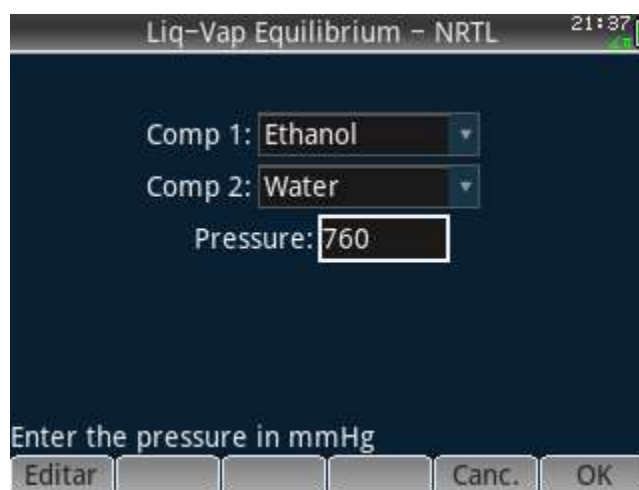
- 1) Once downloaded, drag the "Liq-Vap Equilibrium.hpappdir" folder and drop it into the folder on the calculator.



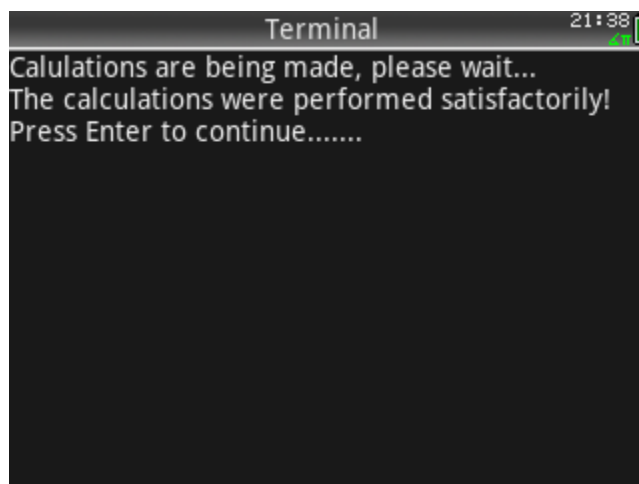
- 2) Verify that the program appears in this way, otherwise it may be due to the fact that the installation was not performed correctly or that there was a problem of firmware version differences.



- 3) Enter the application, select the components to work, operating pressure in mmHg and then press OK. For example, ethanol and water at a pressure of 760 mmHg will be chosen.



- 4) Wait for the calculations to complete, and then press Enter.



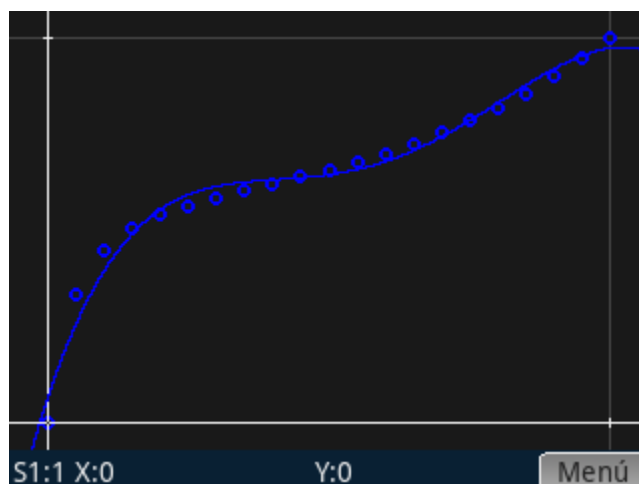
- 5) You will see the results on the screen:
- The first column corresponds to the molar fraction "x" of the first compound in liquid phase.
 - The second column corresponds to the molar fraction "y" of the first vapor phase compound
 - The third column corresponds to the temperature in degrees Kelvin
 - The fourth column corresponds to the enthalpy of the liquid phase in kcal / kmol
 - The fifth column corresponds to the enthalpy of the vapor phase in kcal / kmol

Liq-Vap Equilibrium - NRTL 21:41

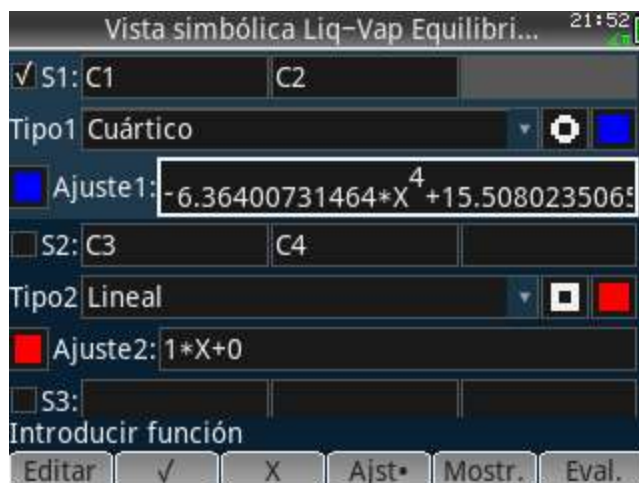
	x	y	T[K]	hliq[kcal/kmol]
1	0	0	373.13780	1,321.2626
2	0.05	0.3306688	363.42488	1,076.0994
3	0.1	0.4459942	359.40874	942.92158
4	0.15	0.5040796	357.31147	846.60090
5	0.2	0.5395870	356.05740	766.18735
6	0.25	0.5647651	355.22014	693.65153
7	0.3	0.5849462	354.59666	625.39016
8	0.35	0.6029946	354.09162	559.76668
9	0.4	0.6205015	353.65475	495.96256
10	0.45	0.6384564	353.26125	433.56648
0				

Editar Más Ir a Ir → Canc. OK

- 6) By pressing OK, you can see the "x" vs "y" graph, which is the most useful of the liquid-vapor equilibrium graphs, since with this you can determine the number of plates of a distillation column by means of the McCabe-Thiele graphic method.



- 7) If you press the “Symb” key, you can see the fourth order polynomial curve that fits the data of “x” vs “y”.



ABOUT THE CALCULATION METHOD

The success or failure of the distillation depends fundamentally on the equilibrium data of the system, which is why it is necessary to look for mechanisms that allow to establish said balance with a high degree of certainty.

Our application in HP prime, offers the calculation of the real equilibrium data by means of the activity coefficients method through the relation: NRTL.

While there are relationships such as: Van Laar, UNIQUAC, Chao Seeder, etc; One of the most used is the NRTL method whose formula to calculate the activity coefficient of the component "i" is:

$$\ln(\gamma_i) = \frac{\sum_j^N \tau_{ji} \cdot G_{ji} \cdot x_j}{\sum_j^N G_{ji} \cdot x_j} + \sum_j^N \frac{x_j \cdot G_{ij}}{\sum_k^N G_{kj} \cdot x_k} \left[\tau_{ij} - \frac{\sum_k^N \tau_{kj} G_{kj} \cdot x_k}{\sum_k^N G_{kj} \cdot x_k} \right]$$

According to the definition of equilibrium constant we have:

$$k_i = \frac{y_i}{x_i}$$

And the equilibrium constant for real solutions is:

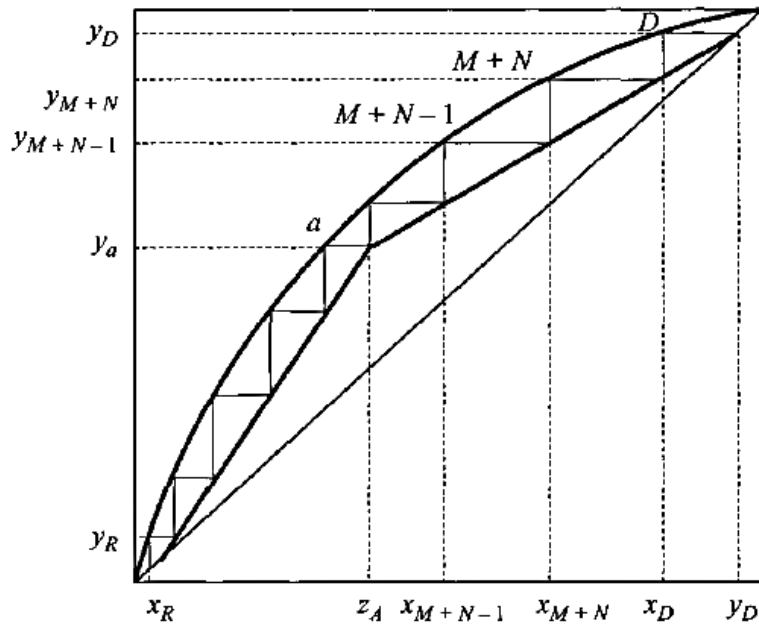
$$k_i = \gamma_i \cdot k_i^o$$

Where k_i^o is the ideal equilibrium constant, in our case calculated thanks to the Antoine equation.

$$k_i^o = \frac{Pv_i}{P_{operation}} \quad \ln(Pv_i) = A - \frac{B}{T_i + C}$$

For the calculation of the number of theoretical plates there are several methods, among which the most prominent are:

a) McCabe-Thiele



b) Ponchon-Savarit

