

# Diseño, Simulación, Optimización y Seguridad de Procesos

Selección de paquetes fisicoquímicos

2024

Prof.: Dr. Nicolás J. Scenna

Prof.: Dr. Néstor H. Rodríguez

J.T.P.: Dr. Juan I. Manassaldi

# Constante de equilibrio

$$y_i = K_i x_i \quad \forall i$$

$\phi/\phi$

$\gamma/\phi$

$$K_i = \frac{\phi_i^L}{\phi_i^V}$$

$$K_i = \frac{\gamma_i \phi_i^s P_i^s P_{oy_i}}{\phi_i^V P}$$

## Selección de un paquete de estimación de propiedades

- Seleccionar un “paquete” de estimación de propiedades corresponde a elegir el conjunto de ecuaciones e hipótesis con las que se van a calcular las propiedades.
- En general se los identifica mediante un nombre (Peng Robinson, NRTL, UNIQUAC, Raoult Law, etc.) pero en su interior se contemplan muchas decisiones respecto al cálculo.
- Cada paquete tiene opciones por defecto que deben ser revisadas por el usuario para asegurarse la correcta representación fisicoquímica de las mezclas intervinientes.

## Ejemplo I: Selección de un paquete de estimación de propiedades

- La imagen corresponde a la selección del paquete NRTL en el simulador Aspen HYSYS.

The image shows two dialog boxes from Aspen HYSYS. The left dialog, 'Property Package Selection', lists various packages with 'NRTL' selected. The right dialog, 'Activity Model Specifications', shows the following settings:

Vapour Model	Ideal
Density Method	Costald
UNIFAC Estimation Temp	298.1500 K
Use Poynting Correction	<input checked="" type="checkbox"/>

Annotations with red arrows point to these settings:

- 'Ideal' is labeled 'EOS de fase vapor'.
- 'Costald' is labeled 'Modelo para la densidad de la fase líquida'.
- The checked box for 'Use Poynting Correction' is labeled 'Poynting sí o no'.

Below the right dialog, it states: 'No Parameters required for the selected Property Package.'

**¡También se deben revisar los coeficientes de interacción binaria!**

- En el HELP del simulador se puede encontrar que ecuaciones se utilizan para cada propiedad.

## Ejemplo II: Selección de un paquete de estimación de propiedades

- La imagen corresponde a la selección del paquete Peng Robinson en el simulador Aspen Plus.

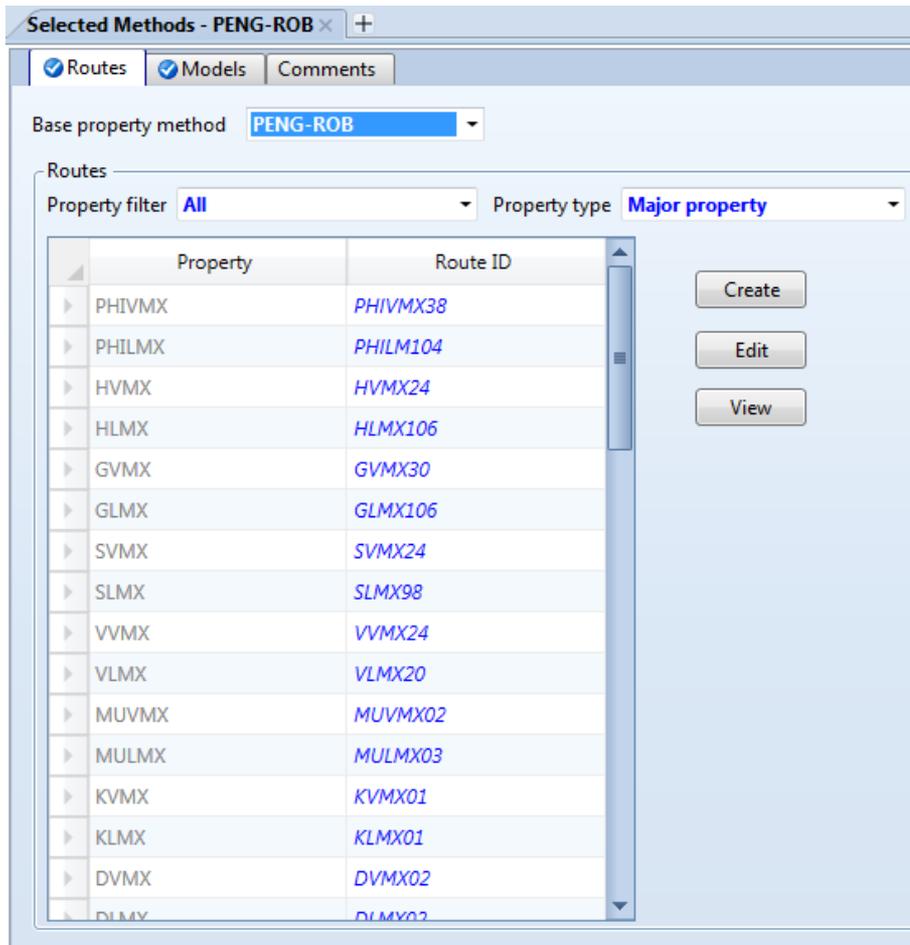
The screenshot shows the 'Methods - Specifications' dialog box in Aspen Plus. The 'Global' tab is selected. Under 'Property methods & options', the 'Method filter' is set to 'COMMON' and the 'Base method' is 'PENG-ROB'. The 'Petroleum calculation options' section includes 'Free-water method' set to 'STEAM-TA' and 'Water solubility' set to '3'. The 'Electrolyte calculation options' section has 'Chemistry ID' set to an empty field and the 'Use true components' checkbox checked. The 'Method name' is 'PENG-ROB'. The 'Modify' section is expanded, showing the following settings: EOS is 'ESPRSTD', Data set is '1', Liquid gamma is empty, Data set is empty, Liquid molar enthalpy is 'HLMX106', and Liquid molar volume is 'VLMX20'. Other options like 'Heat of mixing', 'Poynting correction', and 'Use liquid reference state enthalpy' are unchecked.

Entalpía de la fase líquida

Densidad de la fase líquida

## Ejemplo II: Selección de un paquete de estimación de propiedades

- El simulador ASPEN PLUS tiene un listado detallado de que modelo utiliza para cada propiedad.



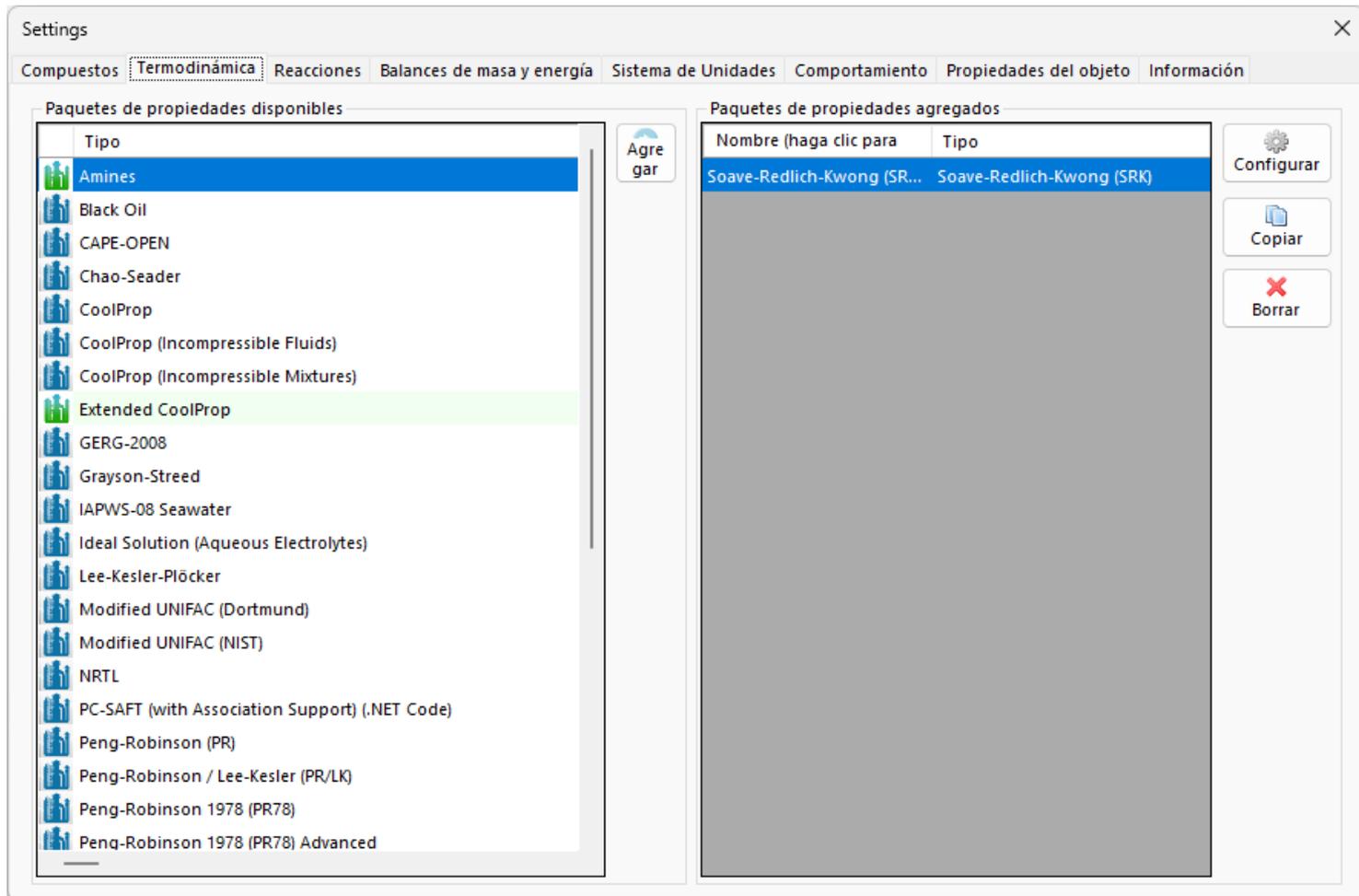
The screenshot displays the 'Selected Methods - PENG-ROB' window. The 'Base property method' is set to 'PENG-ROB'. The 'Routes' section is active, showing a list of property routes. The 'Property filter' is set to 'All' and the 'Property type' is set to 'Major property'. The list includes the following properties and their corresponding Route IDs:

Property	Route ID
PHIVMX	PHIVMX38
PHILMX	PHILM104
HVMX	HVMX24
HLMX	HLMX106
GVMX	GVMX30
GLMX	GLMX106
SVMX	SVMX24
SLMX	SLMX98
VVMX	VVMX24
VLX	VLX20
MUVMX	MUVMX02
MULMX	MULMX03
KVMX	KVMX01
KLMX	KLMX01
DVMX	DVMX02
DLX	DLX02

Buttons for 'Create', 'Edit', and 'View' are visible on the right side of the list.

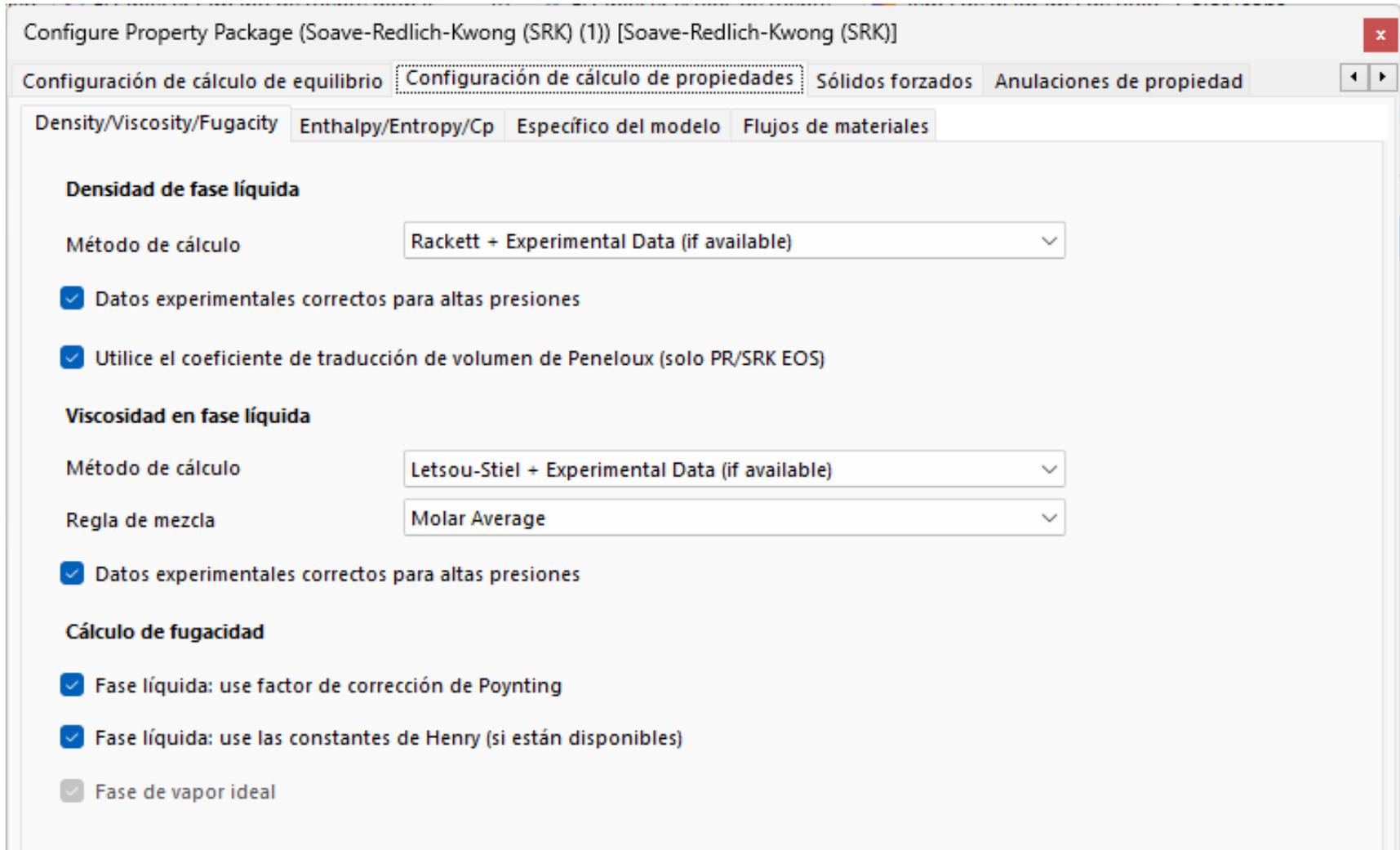
# Ejemplo III: Selección de un paquete de estimación de propiedades

- La imagen corresponde a la selección del paquete SRK en el simulador DWSIM.



# Ejemplo III: Selección de un paquete de estimación de propiedades

- Opciones por defecto en el paquete.



Configure Property Package (Soave-Redlich-Kwong (SRK) (1)) [Soave-Redlich-Kwong (SRK)]

Configuración de cálculo de equilibrio Configuración de cálculo de propiedades Sólidos forzados Anulaciones de propiedad

Density/Viscosity/Fugacity Enthalpy/Entropy/Cp Específico del modelo Flujos de materiales

**Densidad de fase líquida**

Método de cálculo Rackett + Experimental Data (if available)

Datos experimentales correctos para altas presiones

Utilice el coeficiente de traducción de volumen de Peneloux (solo PR/SRK EOS)

**Viscosidad en fase líquida**

Método de cálculo Letsou-Stiel + Experimental Data (if available)

Regla de mezcla Molar Average

Datos experimentales correctos para altas presiones

**Cálculo de fugacidad**

Fase líquida: use factor de corrección de Poynting

Fase líquida: use las constantes de Henry (si están disponibles)

Fase de vapor ideal

## Ejemplo IV: Selección de un paquete de estimación de propiedades

- La imagen corresponde a los paquetes disponibles en el simulador para destilación ChemSep.

The screenshot displays the 'Physical properties' tab in the ChemSep software, which is active and marked with a green checkmark. Other tabs include 'Thermodynamics' (marked with a red X) and 'Reactions' (marked with a green checkmark). The 'Select Thermodynamic Models' section is expanded, showing a list of models for various properties:

- K-value:** A dropdown menu is open, listing: Raoult's law, EOS, Gamma-Phi, DECHEMA, Chao-Seader, Polynomial K, Liquid-Liquid (gamma), Prausnitz, Wilson, Relative volatility, and Liquid-Liquid (phi).
- Equation of state:** No model is selected.
- Activity coefficient:** No model is selected.
- Vapour pressure:** No model is selected.
- Enthalpy:** No model is selected.

The 'Enthalpy / Exergy' section contains the following settings:

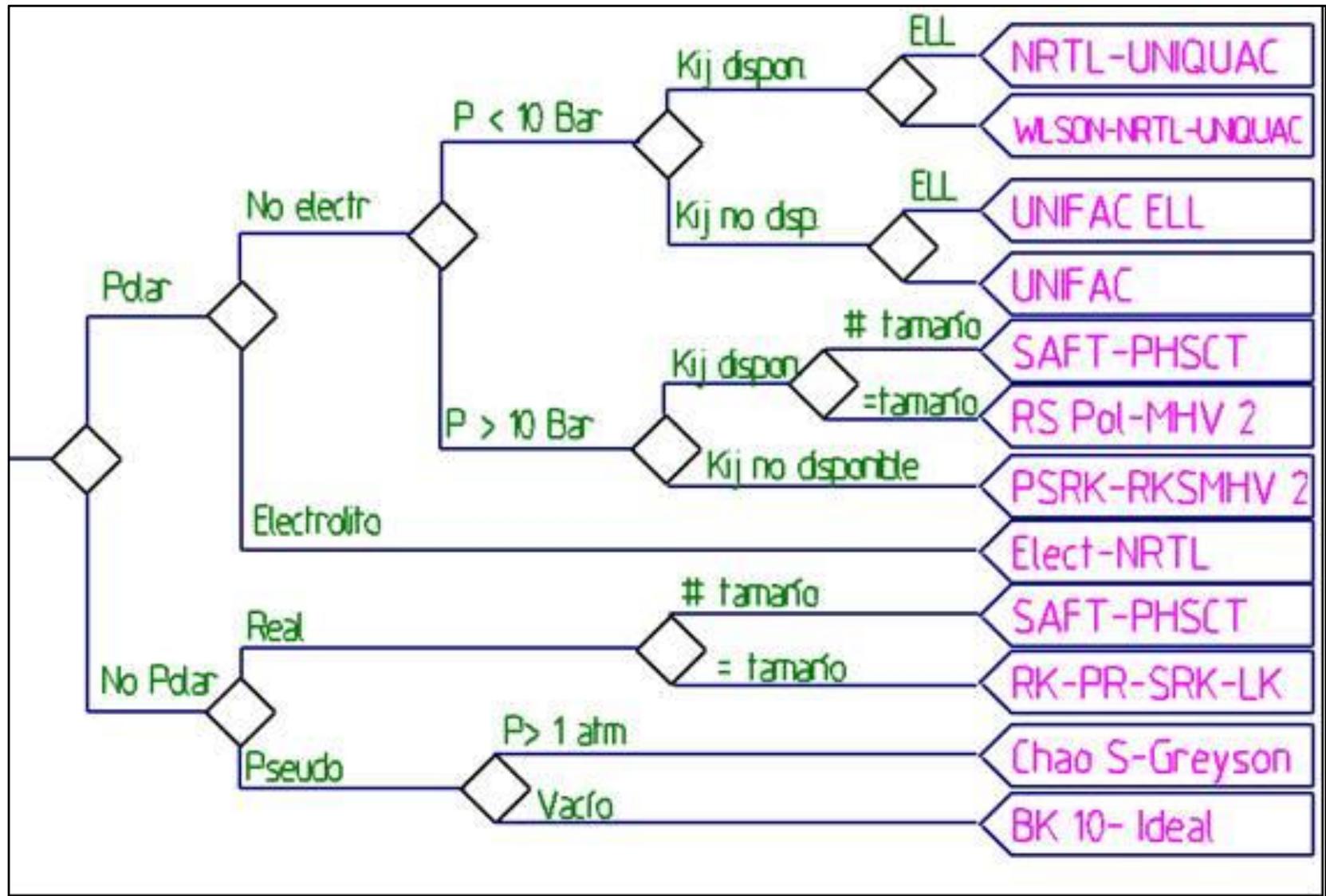
- Reference state:** Vapour (dropdown), 298.1 (K) (text input).
- Heat of formation:** Excluded (dropdown).
- Surroundings T:** 298.150 (K) (text input).
- Heat Capacity IG:** T correlation (dropdown).
- Heat Capacity L:** Mole fraction  $a^L$  (dropdown).

There is an unchecked checkbox for 'Henry's law components' on the right side of the interface.

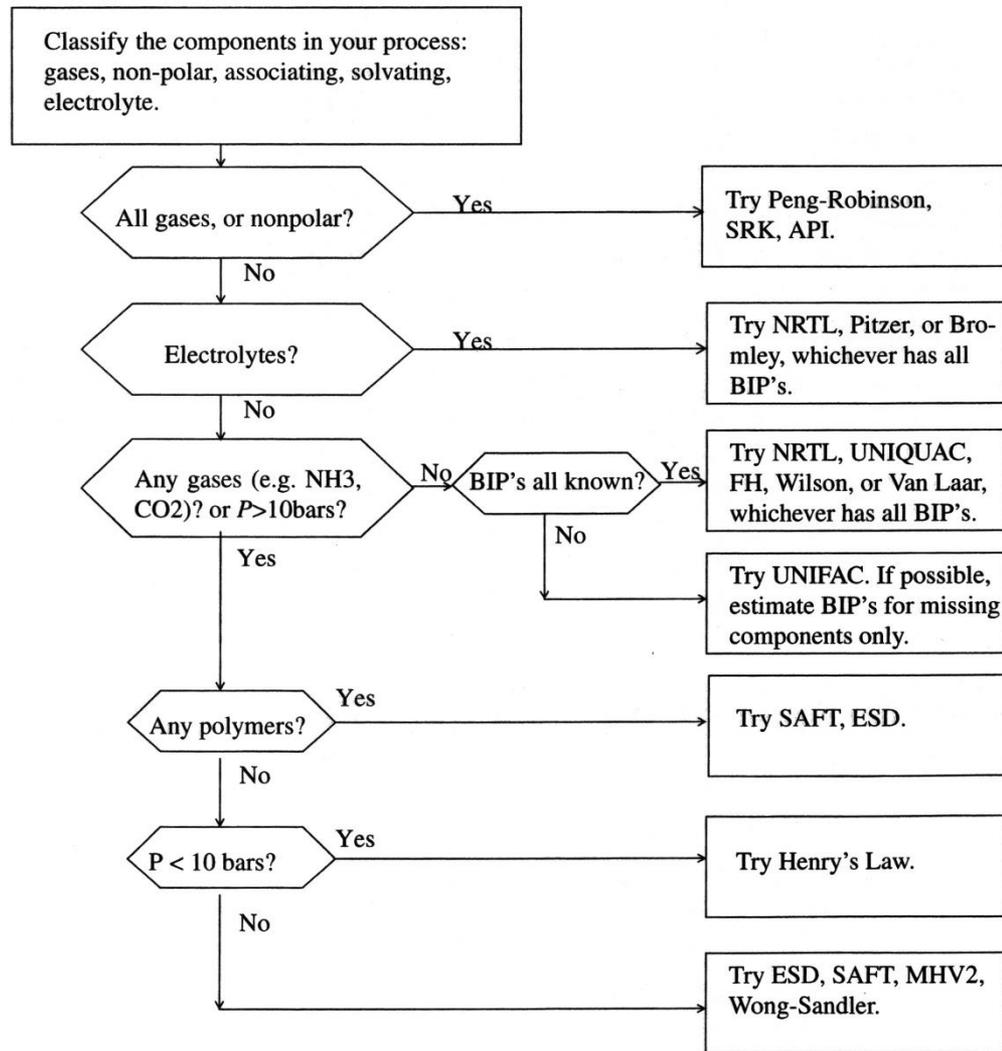
# Elección del paquete de propiedades fisicoquímicas

<b>Aplicación</b>	<b>Margules</b>	<b>Van Laar</b>	<b>Wilson</b>	<b>NRTL</b>	<b>UNIQUAC</b>
Sistemas binarios	Aplicable	Aplicable	Aplicable	Aplicable	Aplicable
Sistemas de Múltiple componentes	Aplicación limitada	Aplicación limitada	Aplicable	Aplicable	Aplicable
Sistemas azeotrópicos	Aplicable	Aplicable	Aplicable	Aplicable	Aplicable
Equilibrio Líquido-Líquido	Aplicable	Aplicable	Aplicación limitada	Aplicable	Aplicable
Sistemas diluidos	Cuestionable	Cuestionable	Aplicable	Aplicable	Aplicable
Sistemas de asociación individual	Cuestionable	Cuestionable	Aplicable	Aplicable	Aplicable
Polímeros	No Aplica	No Aplica	No Aplica	No Aplica	Aplicable
Extrapolación	Cuestionable	Cuestionable	Bueno	Bueno	Bueno

# Elección del paquete de propiedades fisicoquímicas

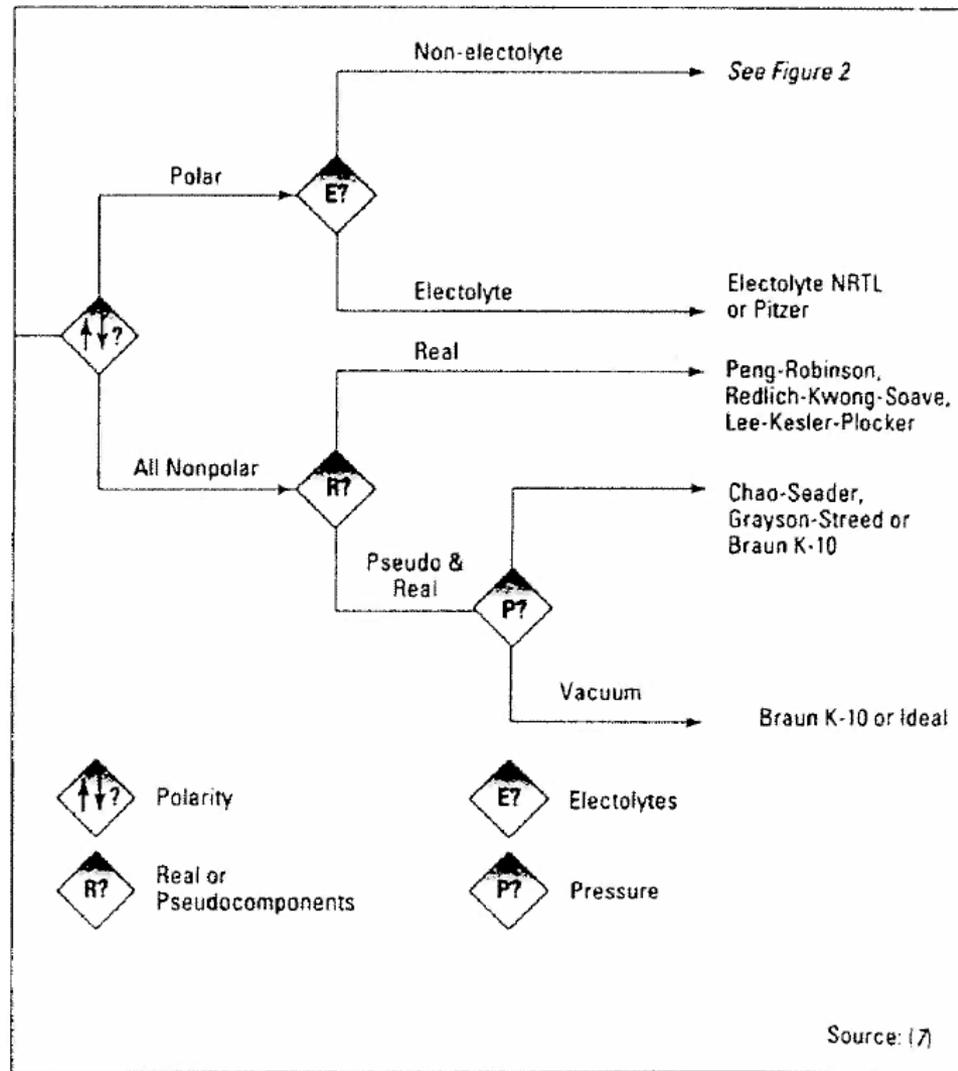


# Elección del paquete de propiedades fisicoquímicas



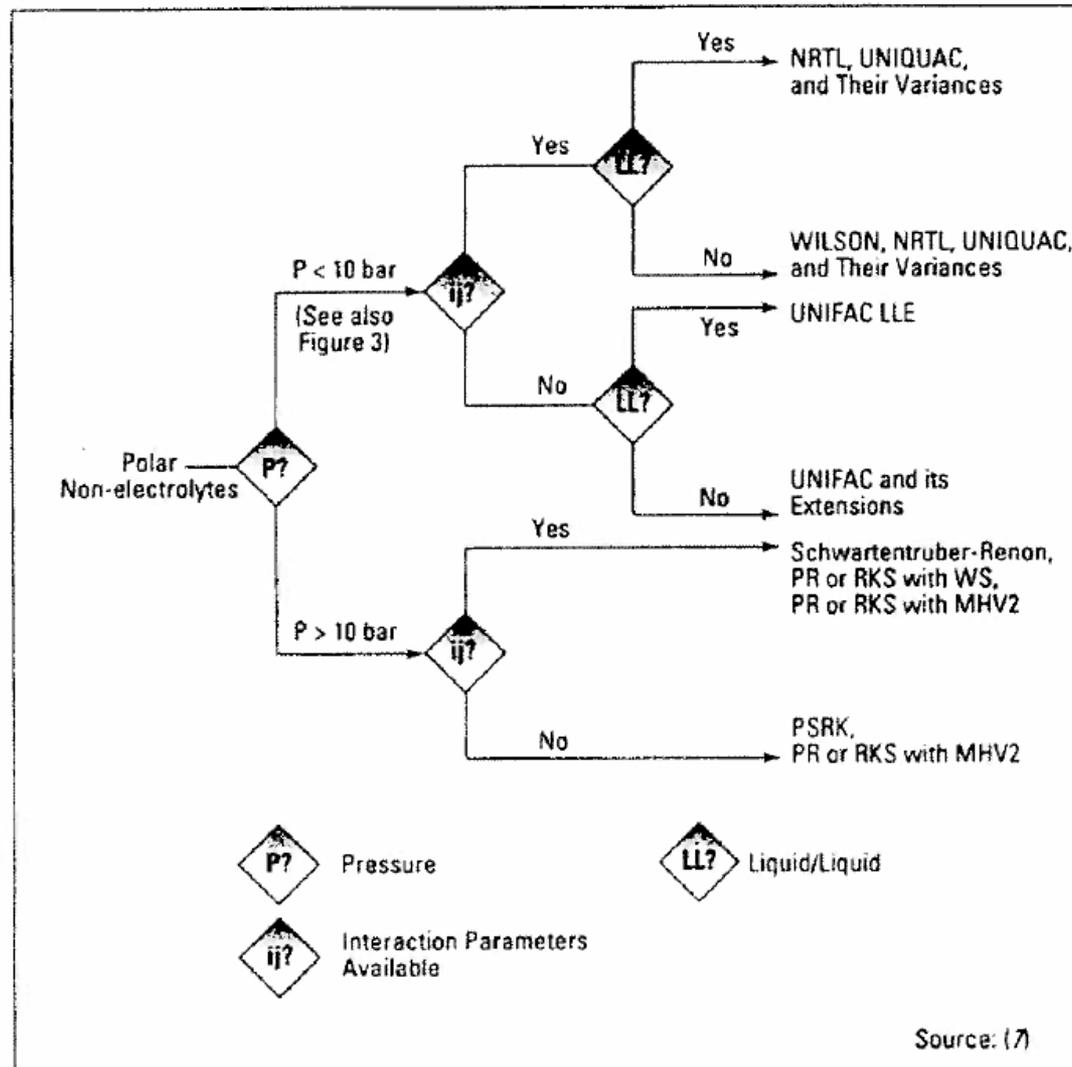
**Figure D.1** Flow chart to select the best thermodynamic model. The abbreviation BIP is used to mean binary interaction parameters.

# Don't Gamble With Physical Properties For Simulation



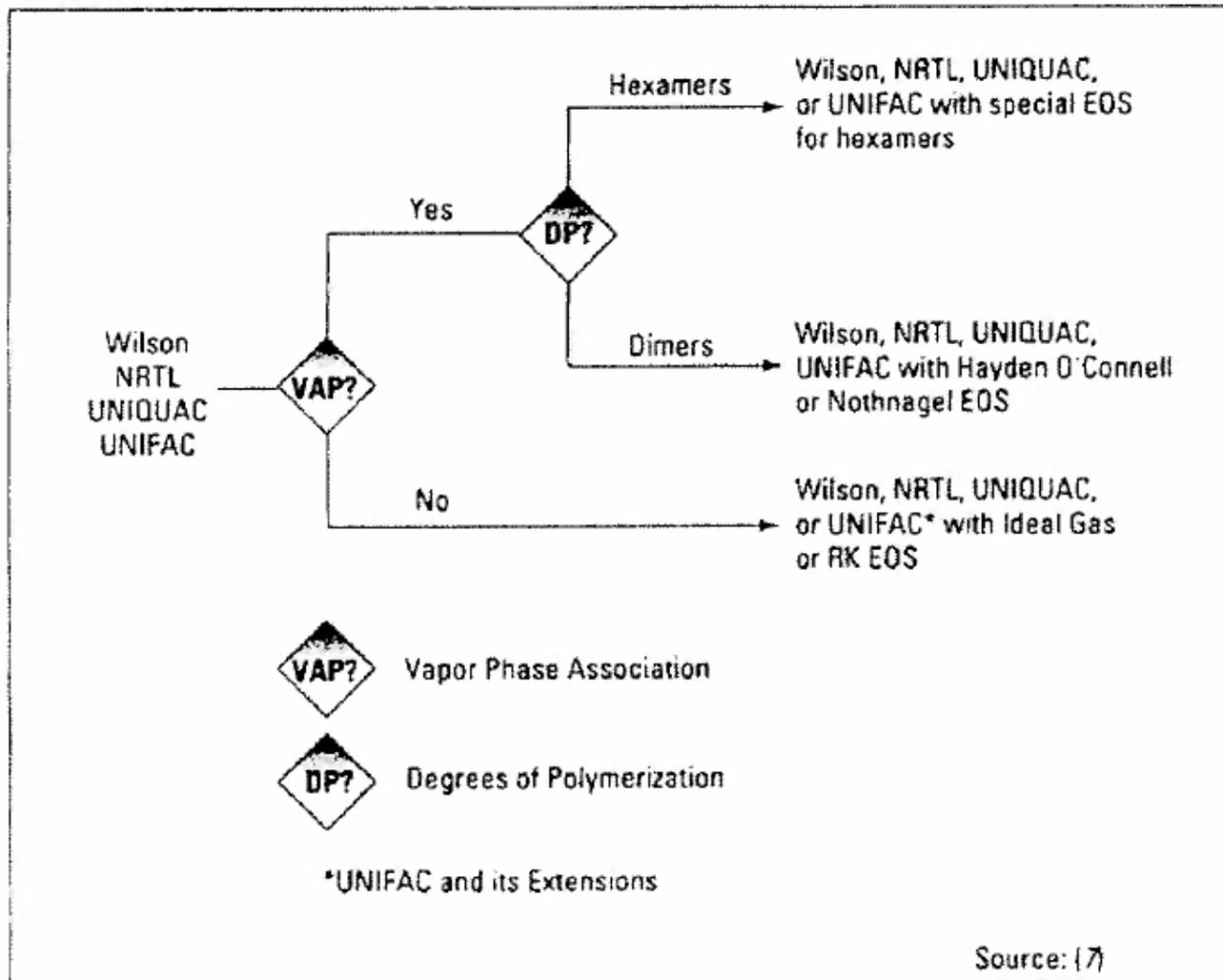
■ Figure 1. The first steps for selecting physical property methods.

# Don't Gamble With Physical Properties For Simulation



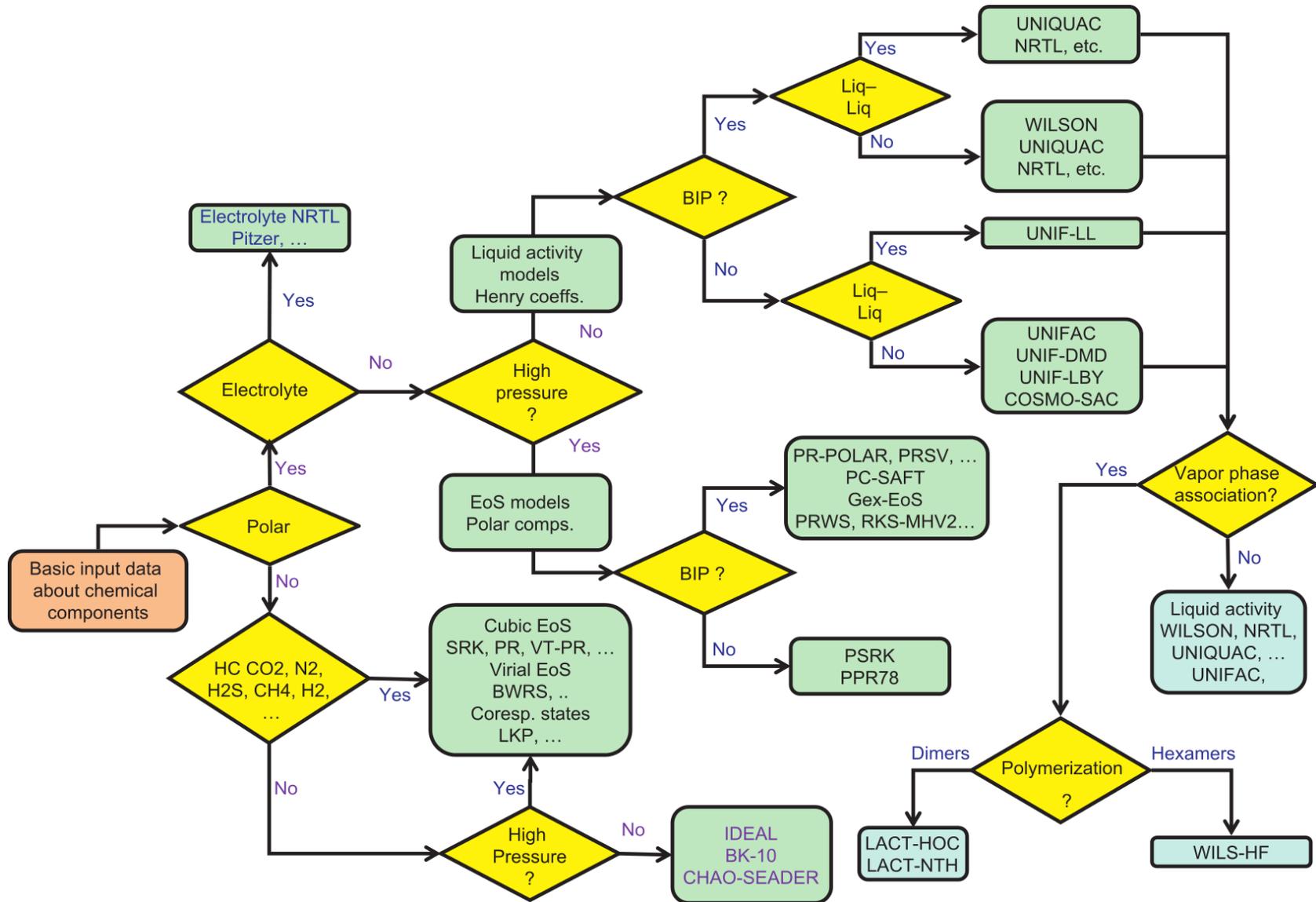
■ Figure 2. Proceeding for polar and nonelectrolyte components.

# Don't Gamble With Physical Properties For Simulation



■ Figure 3. Options for vapor-phase calculations with activity-coefficient models.

# Integrated Design and Simulation of Chemical Processes



## Bibliografía

- Scenna, N.J. (2002). Modelado, simulación y optimización de procesos químicos (Eduotec-UTN).
- Poling, B.E., Prausnitz, J.M., y O'Connell, J.P. (2000). The Properties of Gases and Liquids 5E (McGraw Hill Professional).
- Gmehling, J., y Kolbe, B. (2012). Chemical Thermodynamics for Process Simulation (John Wiley & Sons).
- Dimian A. C., Bildea C. S., Kiss A. A. (2014). Integrated Design and Simulation of Chemical Processes (Elsevier).
- Hemptinne, J.-C., Ledanois, J.-M., 2012. SELECT THERMODYNAMIC MODELS FO. ED TECHNIP, Paris.
- Apuntes de la cátedra Integración IV.