



XVII encuentro
Participación de la
Mujer
en la Ciencia



COMPARACIÓN DE MODELOS TERMODINÁMICOS Y REGLAS DE MEZCLADO PARA LA SIMULACIÓN DE PROCESOS DE EXTRACCIÓN USANDO FLUIDOS SUPERCRÍTICOS

JOSÉ IVÁN ABRAHAM DIEGO¹ y Adrián Bonilla-Petriciolet¹

¹ Instituto Tecnológico de Aguascalientes. joseivanad@hotmail.com

Los fluidos supercríticos tienen una gran flexibilidad para ser utilizados en una amplia variedad de procesos donde su aplicación abarca desde estrategias de extracción hasta la síntesis de nuevos compuestos debido a sus propiedades intermedias entre líquidos y gases. La ingeniería del sistema de procesos de las operaciones basadas en fluidos supercríticos requiere modelos termodinámicos confiables. El presente trabajo reporta un estudio comparativo de modelos termodinámicos para simular el equilibrio vapor-líquido de los procesos de extracción supercrítica. En particular, las ecuaciones de estado Peng-Robinson y Soave-Redlich-Kwong se utilizaron con diferentes reglas de mezclado. Los cálculos de equilibrio de fase se realizaron con ayuda de la base de datos termodinámicos en Aspen Plus. Los resultados mostraron que las ecuaciones de estado pueden fallar al predecir de manera confiable los datos experimentales usando los parámetros de interacción disponibles en el simulador Aspen Plus. De hecho, los cálculos realizados mostraron que los parámetros de interacción juegan un papel importante para proporcionar la predicción del equilibrio de fase que involucra fluidos supercríticos. Los cálculos de equilibrio de fase se mejoraron aplicando un algoritmo genético para el ajuste de los parámetros de interacción en las reglas de mezclado correspondientes.