

**MODULO TUTORIAL PARA EL ESTUDIO DE UNA TORRE DE DESTILACIÓN
FRACCIONADA A ESCALA PILOTO: MODELADO Y SIMULACIÓN**



**ALFONSO BARBOZA MEZA
JENNYFER DÍAZ ANGULO**

**UNIVERSIDAD DE CARTAGENA
FACULTAD DE INGENIERIA
PROGRAMA DE INGENIERIA QUÍMICA
CARTAGENA DE INDIAS D.T Y C**

2013

**MODULO TUTORIAL PARA EL ESTUDIO DE UNA TORRE DE
DESTILACIÓNFRACCIONADA A ESCALA PILOTO: MODELADO Y
SIMULACIÓN**

**ALFONSO BARBOZA MEZA
JENNYFER DÍAZ ANGULO**

Trabajo de grado para optar al título de Ingeniero Químico

**Director
Ing. Miguel Angel Mueses, Ph.D.**

**UNIVERSIDAD DE CARTAGENA
FACULTAD DE INGENIERIA
PROGRAMA DE INGENIERIA QUÍMICA
CARTAGENA DE INDIAS D.T Y C
2013**

Nota De Aceptación

Firma del Jurado

Firma del Jurado

Cartagena/19/06/2013

DEDICATORIA

A mis padres...

Por haberme apoyado en todo momento, otorgarme las herramientas para afrontarme a los obstáculos del vivir y hacer posible que hoy día sea un profesional. Por haber sido el cimiento de los pilares de mi formación integral como ser, por su compromiso, responsabilidad, preocupación, sacrificio y amor.

Alfonso Barboza Meza

DEDICATORIA

A MI MADRE, porque a pesar de las dificultades que se presentan en la vida nunca desfalleció, por crear un ambiente en el que pudiera desarrollarme no solo académicamente sino de manera integral, por escucharme, comprenderme, y aceptarme tal cual soy, por ser la mejor madre que mi hermano y yo pudiéramos tener, porque es una de las personas que más admiro, por y para ella.

Jennyfer Díaz Angulo

AGRADECIMIENTOS

Agradecemos a la vida por permitirnos realizar este proyecto investigativo y culminar satisfactoriamente nuestro proceso académico.

En segundo lugar y muy especialmente queremos expresar gratitud a nuestros padres y hermanos quienes han estado presentes en los momentos más significativos de nuestras vidas y nos han brindado su apoyo para enfrentar con dignidad y entereza las diferentes situaciones que se presentan en la vida.

A nuestro director Miguel Angel Mueses por brindarnos su asistencia, orientación y apoyo en toda la duración de la investigación. Por impulsarnos a ser mejores estudiantes e ilustrarnos con sus enseñanzas.

A la Universidad de Cartagena por brindarnos el apoyo necesario para el desarrollo de esta investigación, al facilitarnos la torre de destilación a escala piloto y el espectrofotómetro, también al auxiliar de laboratorio de Ingeniería Química, que de manera muy atenta nos colaboró, en la capacitación y manejo de los equipos, permitiendo culminar de manera satisfactoria este proyecto de grado.

CONTENIDO

pág.

RESUMEN

ABSTRACT

INTRODUCCIÓN.....	1
1. OBJETIVOS.....	3
1.1 OBJETIVO GENERAL	3
1.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS	3
2. MARCO DE REFERENCIA	4
2.1 ESTADO DEL ARTE	4
2.2 ANTECEDENTES.....	6
2.3 MARCO TEÓRICO	8
2.3.1 Destilación.....	8
2.3.2 Destilación Discontinua	9
2.3.3 Ecuaciones MESH	13
2.4 ALGORITMO DE THOMAS	16
2.5 MÉTODO DE PUNTO DE BURBUJA O ALGORITMO DE WANG-HENKE.....	20
2.6 MÉTODO DE RUNGE-KUTTA DE 4° ORDEN	24
2.7 MODELO TERMODINAMICO UNIFAC.....	25
2.8 MODELO TERMODINAMICO PSRK.....	26
3. METODOLOGIA	27
3.1 TIPO DE INVESTIGACION	27
3.2 TECNICAS DE RECOLECCIÓN DE INFORMACIÓN	27
3.2.1 Fuentes de información primaria.	27
3.2.2 Fuentes de información secundaria.....	27
3.3 VARIABLES	28
3.3.1 Variables Independientes	28
3.3.2 Variables Dependientes.....	28
3.3.3 Variables Intervinientes	28
3.4 PROCEDIMIENTO	29

3.4.1 EQUIPOS	29
3.4.2 MATERIALES Y MÉTODOS	31
3.4.3 DISEÑO EXPERIMENTAL	32
3.4.4 PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL	33
3.5 MODELADO MATEMATICO	34
3.5.1 Consideraciones generales del modelo matemático.....	34
3.6 MODELADO TERMODINÁMICO	37
3.6.1 Equilibrio líquido – vapor	37
3.7 MÉTODO DE SOLUCIÓN DEL MODELO MATEMÁTICO.....	38
3.8. VALIDACIÓN.....	39
3.8.1 Validación del modelo Termodinámico.....	39
3.8.2 Validación del modelo Matemático	39
3.9. CONSTRUCCIÓN DEL MÓDULO TUTORIAL	40
4. RESULTADOS	41
4.1 VALIDACIÓN DEL MODELADO TERMODINÁMICO	41
4.2 VALIDACIÓN DEL MODELADO MATEMATICO.....	42
4.3 MODULO TUTORIAL.....	48
5. CONCLUSIONES	57
6. RECOMENDACIONES	58
REFERENCIAS.....	59
ANEXOS.....	62

INDICE DE TABLAS

	pág.
Tabla 1. Comportamiento de una torre de rectificación discontinua a reflujo constante....	11
Tabla 2. Operacionalización de las variables.....	28
Tabla 3. Diseño experimental.....	32
Tabla 4. Datos reales y simulados en los platos 1, 3 y 5 para una composición de alimentación de 0.15 molar, operando a reflujo total.....	43
Tabla 5. Datos reales y simulados en los platos 1, 3 y 5 para una composición de alimentación de 0.4 molar, operando a reflujo total.....	43

INDICE DE FIGURAS

	pág.
Figura 1. Representación esquemática de una etapa de equilibrio j	13
Figura 2. Esquema del tope y fondo de una columna de destilación.	15
Figura 3. Algoritmo del método del punto de burbuja (wang-henke)	23
Figura 4. Torre de destilación a escala piloto	30
Figura 5. Espectrofotómetro UV-VIS	31
Figura 6. Algoritmo general para la solución del modelado matemático	38
Figura 7. Perfil de concentración de etanol en fase gaseosa	41
Figura 8. Grafica de dispersión de la temperatura de burbuja	42
Figura 9. Comportamiento real y simulado en los platos 1, 3 y 5 para una composición de alimentación de 0.15 molar, operando a reflujo total.	44
Figura 10. Comportamiento real y simulado en los platos 1, 3 y 5 para una composición de alimentación de 0.4molar, operando a reflujo total.	44
Figura 11. Comportamiento real y simulado en los platos 1, 3, 5 y en el producto destilado, para una composición de alimentación de 0.15 molar, operando sin reflujo. ...	45
Figura 12. Comportamiento real y simulado en los platos 1, 3, 5 y en el producto destilado, para una composición de alimentación de 0.4 molar, operando sin reflujo.	46
Figura 13. Grafica de dispersión del modelado matemático.....	47
Figura 14. Presentación del módulo tutorial	48
Figura 15. Descripción del menú	49
Figura 16. Equilibrio termodinámico.....	50
Figura 17. Interfaz gráfica para el cálculo de entalpías.	51
Figura 18. Interfaz gráfica para la aplicación el método mccabe-thiele	52
Figura 19. Interfaz gráfica de la validación del modelado matemático.	53
Figura 20. Simulador de la torre de destilación operando a reflujo total.	54
Figura 21. Simulador de la torre de destilación operando sin reflujo.	55
Figura 22. Interfaz gráfica para el reporte de datos simulados.	55

INDICE DE ANEXOS

	pág.
ANEXO A. Cálculo de entalpías.....	63
Tabla A1. Constantes para el cálculo de la capacidad calorífica de la fase líquida.....	63
Tabla A2. Constantes para el cálculo de la capacidad calorífica de la fase vapor.....	63
ANEXO B. Cálculo de presiones de vapor y temperaturas de saturación.....	65
Tabla B.1. Constantes de la ecuación de Antoine.....	65
Figura B.1. Algoritmo de punto de burbuja.....	66
ANEXO C. Curva de calibración.....	67
Tabla C.1. Datos de Absorbancia.....	67
Figura C.1. Curva de calibración.....	67
ANEXO D. Ecuaciones y parámetros de los modelos termodinámicos.....	68
Tabla D.1. Parámetros del método UNIFAC.....	68
Tabla D.2. Propiedades críticas de los componentes.....	69
Tabla D.3. Coeficientes de Mathias-Copeman.....	70
Figura D.1. Algoritmo el cálculo del coeficiente de fugacidad.....	70
ANEXO E. Gráficas y tablas para composiciones de alimentación de 0.25 y 0.35.....	71
Figura. E.1. Comportamiento real y simulado en los platos 1, 3 y 5 para una composición de alimentación de 0.25 molar, operando a reflujo total.....	71

Tabla E.1. Datos reales y simulados en los platos 1, 3 y 5 para una composición de alimentación de 0.25 molar, operando a reflujo total.....	71
Figura E.2. Comportamiento real y simulado en los platos 1, 3 y 5 para una composición de alimentación de 0.35 molar, operando a reflujo total.....	71
Tabla E.2. Datos reales y simulados en los platos 1, 3 y 5 para una composición de alimentación de 0.25 molar, operando a reflujo total.....	72
Figura E.3. Comportamiento real y simulado en los platos 1, 3, 5 y en el producto destilado, para una composición de alimentación de 0.25 molar, operando sin reflujo.....	72
Figura E.4. Comportamiento real y simulado en los platos 11, 3, 5 y en el producto destilado, para una composición de alimentación de 0.35 molar, operando sin reflujo.....	72
Tabla E.3. Datos reales y simulados para los platos 1, 3 ,5 y destilado, con una carga de alimentación de 0.25 molar, operando sin reflujo.....	73
Tabla E.4. Datos reales y simulados para los platos 1, 3 ,5 y destilado, con una carga de alimentación de 0.35 molar, operando sin reflujo.....	73
Tabla E.5. Datos reales y simulados para los platos 1, 3 ,5 y destilado, con una carga de alimentación de 0.15 molar, operando sin reflujo.....	74
Tabla E.6. Datos reales y simulados para los platos 1, 3 ,5 y destilado, con una carga de alimentación de 0.4 molar, operando sin reflujo.....	74
ANEXO F. Curva de equilibrio para la mezcla etanol-agua, con datos de equilibrio simulado y experimental.....	75
Figura F.1. Curva de equilibrio de la mezcla etanol-agua.....	75
Tabla F.1. Datos de equilibrio simulados y experimentales de la mezcla etanol-agua.....	75

RESUMEN

En el presente trabajo se desarrolló un software para la simulación de la torre de destilación a escala piloto ubicada en el Laboratorio de Operaciones Unitarias del Programa de Ingeniería Química en la universidad de Cartagena. Para plantear el modelo matemático que rige el proceso se utilizó el concepto de etapa de equilibrio, implementando las ecuaciones MESH (balances de materia y energía, sumatoria de fracciones, relaciones de equilibrio), las cuales se solucionaron por los algoritmos de Thomas y Wang-Henke para el cálculo de la condición de operación inicial de la columna en el estado estable; y acoplados al método Runge-kutta, para la componente dinámica de la misma. Los resultados obtenidos fueron validados con datos experimentales de la torre de destilación a escala piloto, reportándose desviaciones que oscilan en un rango de 1.51% a 0.02%, para un promedio de 0.48%, con lo cual queda demostrada la efectividad de la solución de los modelos y su capacidad de convergencia. El software fue construido en la interfaz gráfica de MATLAB, cuenta con una plataforma de simulación en la que se generan gráficas y tablas para facilitar la comprensión del comportamiento de las variables que intervienen en el proceso de destilación, además contiene otras herramientas entre las cuales se pueden destacar la aplicación del método McCabe-Thiele, el cálculo de entalpías y equilibrio termodinámico para la mezcla etanol agua a diferentes condiciones de presión, la descripción del concepto y los tipos de destilación, y una breve explicación acerca de los métodos de solución empleados.

Palabras clave: Interfaz Gráfica, Torre de Destilación, MATLAB, Algoritmo de Thomas y Wang-Henke, método de Runge-Kutta.

ABSTRACT

In this work, a simulation software was developed for the pilot scale distillation tower located in the Unit Operations Laboratory of Chemical Engineering Program at the University of Cartagena. To develop the mathematical model that rules the process the concept of equilibrium stage was used, implementing MESH equations (mass and energy balances, sum of fractions, equilibrium relationships), which were resolved through the algorithms of Thomas and Wang-Henke for the calculus of the column initial operating condition in the steady state, and coupled to the Runge-Kutta method for the dynamic component of said column. The results were validated with experimental data of the pilot scale distillation tower, reporting deviations that vary in a range of 1.51% to 0.02% for an average of 0.48%, which demonstrates the effectiveness of the models solution and convergence capacity. The software was built in GUI MATLAB, which has a simulation platform that generates graphs and tables to facilitate the understanding of the behavior of the variables involved in the distillation process. Also it contains other tools like the application of McCabe-Thiele method, the calculation of enthalpies and thermodynamic equilibrium for the water - ethanol mixture at different pressure conditions, the description of the concept and types of distillation, and a brief explanation about the methods of solution employed.

Keywords: GUI, Distillation Tower, MATLAB, Thomas Algorithm and Wang-Henke, Runge-Kutta.

INTRODUCCIÓN

Los softwares de simulación son de gran ayuda para el aprendizaje, análisis y comprensión de fenómenos en Ingeniería Química. Estos permiten la solución de balances de materia y energía, la estimación de propiedades físicas, termodinámicas, fisicoquímicas; estimación de equilibrios termodinámicos y la evaluación de diferentes condiciones de operación, facilitando una mejor toma de decisión a la hora de evaluar un proceso industrial. Sin embargo las licencias de estos simuladores comerciales como Aspen®, PRO II®, o Chemcad®, poseen un elevado costo (alrededor de 6.000 dólares/año para un solo computador y un solo usuario a la vez, sin herramientas básicas en la mayoría de ellos), convirtiéndose en herramientas de difícil adquisición para fines educativos.

Los módulos tutoriales en Ingeniería Química son un conjunto de declaraciones, instrucciones y procedimientos lógico-matemáticos que describen y simulan el comportamiento de un proceso a diferentes condiciones de operación. Estos no requieren una alta inversión en licencias a diferencia de software comerciales, por lo que actualmente son una herramienta viable que se implementa en universidades alrededor del mundo. Domínguez, Bazán y colaboradores [1], diseñaron una interfaz gráfica computacional para destilación multicomponente basada en métodos cortos, Buchholz, Bungartz y Vrabec [2] desarrollaron un software llamado MarDyn donde es posible, la simulación de nano fluidos en Ingeniería Química para mezclas multicomponentes en estados heterogéneos que contengan gran cantidad de partículas. Machuca y Urresta [3] llevaron a cabo en la Universidad del Valle la creación de un Software para la enseñanza de la dinámica y control de intercambiadores de calor de tubos y coraza. El desarrollo de módulos tutoriales no se ve limitado a ningún tipo de sistema. La universidad de Cartagena cuenta con un laboratorio provisto con diferentes equipos de operaciones unitarias (torre de destilación, torre de absorción y extracción liquido-liquido), control de procesos (control de temperatura y nivel), transferencia de calor (intercambiador de calor, convección y conducción forzada) y diferentes tipos de reactores (flujo pistón, batch, CSTR y

adiabático), sin embargo no existe ningún software de aprendizaje que facilite el entendimiento de los fenómenos, o los simule a diferentes condiciones para contrastar datos experimentales y simulados.

El desarrollo y manejo de un módulo tutorial facilita a los estudiantes adquirir conceptos básicos en Ingeniería Química, complementando los fundamentos teóricos recibidos en cátedra. En el presente proyecto se elaboró un software que permite la simulación de una torre de destilación a escala piloto (ubicada en el Laboratorio de Operaciones Unitarias del Programa de Ingeniería Química de la Universidad de Cartagena), a diferentes condiciones de operación.

La modelación de la torre de destilación fraccionada a escala piloto se elaboró a través del concepto de etapa de equilibrio, utilizando las ecuaciones MESH (balances de masa y energía, sumatoria de fracciones y relaciones de equilibrio). Se implementó el algoritmo de Thomas, el cual es un método de eliminación progresiva que utiliza Gaus Jordan para la resolución de matrices; mediante el algoritmo de Wan-Henke acoplado al descrito anteriormente, se obtuvieron las temperaturas, junto con los calores del rehervidor y condensador y los flujos de líquido y vapor, todo esto fue requerido para la obtención de condiciones iniciales, luego se utilizó el método Runge-Kutta de cuarto orden para describir el comportamiento de la torre con respecto al tiempo.

Este proyecto de investigación sigue la línea de modelado, optimización matemática y simulación de equipos de procesos, se encuentra enmarcado en el desarrollo de software para procesos químicos y brinda una herramienta computacional al Programa de Ingeniería química de la Universidad de Cartagena.

1. OBJETIVOS

1.1 OBJETIVO GENERAL

Diseñar una herramienta didáctica e interactiva mediante la elaboración de un módulo tutorial que facilite la comprensión, aprendizaje y funcionamiento de una torre de destilación fraccionada a escala piloto.

1.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Modelar matemáticamente una columna de destilación fraccionada a escala piloto empleando el concepto de etapas de equilibrio (ecuaciones MESH).
- Solucionar el modelo matemático empleado para describir el comportamiento de una torre de destilación fraccionada utilizando los algoritmos acoplados deRK-4, Thomas y Wang-Henke.
- Validar el modelo utilizando datos experimentales obtenidos en la torre de destilación fraccionada.
- Elaborar un módulo tutorial para la enseñanza didáctica del funcionamiento de una torre de destilación fraccionada.

2. MARCO DE REFERENCIA

2.1 ESTADO DEL ARTE

El desarrollo de software para procesos químicos se está implementando cada vez más, no solo para complementar el aprendizaje de las clases catedráticas en universidades, sino también para el control y simulación de plantas y/o equipos industriales.

Domínguez, Bazán y colaboradores [1], diseñaron una interfaz gráfica computacional para destilación multicomponente utilizando métodos cortos, la cual determina por medio de simulaciones en estado estacionario el número de platos necesarios en el proceso de destilación multicomponente, así como la composición en el flujo de destilado y fondos de una torre de destilación. La interfaz gráfica, fue construida en el lenguaje de programación Python 2.5, y permitió presentar los datos de entrada y salida para el caso de columnas de destilación operando en régimen permanente. Los resultados del uso de la interfaz gráfica muestran una forma simple de realizar diseños preliminares de torres de destilación y su potencialidad como material de apoyo para el estudio y comprensión de conceptos básicos en destilación multicomponente.

Buchholz, Bungartz y Vrabec [2] diseñaron un software llamado MarDyn donde es posible, la simulación de nano fluidos en Ingeniería Química para mezclas multicomponentes en estados heterogéneos que contengan gran cantidad de partículas; esta herramienta admitió pruebas y comparación de distintas técnicas de modelado y simulación, además permite el uso de diferentes algoritmos y bibliotecas tales como Open MP y TBB.

Rodríguez, Mena, y Rubio [3] realizaron un estudio experimental a los estudiantes de Ingeniería Química, fueron seleccionados dos grupos, en el primero se implementó un software de simulación para la comprensión y el aprendizaje de fenómenos físicos, en el segundo se utilizaron las mismas estrategias que venían desarrollándose anteriormente, las pruebas estadísticas arrojaron una diferencia significativa entre los dos grupos, concluyéndose que esta nueva herramienta proporciona una amplia visión y entendimiento de los fenómenos y/o procesos a estudiar.

Machuca y Urresta [4], llevaron a cabo en la Universidad del Valle la creación de un software para la enseñanza de la dinámica y control de intercambiadores de calor de tubos y coraza. La descripción del comportamiento de estos equipos se hizo utilizando el método de Bell-Delaware por medio del cual fue calculado los coeficientes de transferencia de calor y la caída de presión en el lado de la coraza. El modelo se validó realizando pruebas experimentales a diferentes condiciones de operación, se obtuvo como resultado un módulo tutorial (programado en lenguaje Visual Basic 6.0) para la enseñanza y aprendizaje de intercambiadores de calor de tubos y coraza que permite modificar condiciones de operación y diseño, tales como temperaturas, caudales, número y longitud de tubos, número de pasos, diámetro externo e interno de los tubos, diámetro interno de coraza y factor de ensuciamiento.

Mesa y Lallemand-Najar [5], desarrollaron en su Trabajo de Grado el modulo tutorial de una torre de destilación, basado en el modelo matemático de sorel con el objetivo de generar una herramienta didáctica e interactiva que facilitara el estudio de torres de destilación que operan con mezclas binarias.

Los diferentes software descritos anteriormente sirven como herramientas para facilitar el entendimiento de fenómenos en Ingeniería Química, por consiguiente los ambientes computacionales diseñados fueron didácticos e interactivos, lo cual fue implementado en el módulo tutorial desarrollado en el presente trabajo.

La estructura computacional del software “AJM-SimDest 1.0” es robusta, debido a la implementación de métodos rigurosos, esto garantiza la validez de las simulaciones, a diferencia de otros trabajos como Mesa y Lallemand-Najar y Domínguez, Bazán y colaboradores que utilizan métodos analíticos.

2.2 ANTECEDENTES

Los crecientes avances tecnológicos contribuyen al desarrollo de programas y software de simulación al brindar plataformas mucho más robustas y estables a la hora de describir sistemas y fenómenos, estos han alcanzado un gran auge en el campo de la ingeniería química, ya que por medio de estos se facilita el aprendizaje de procesos manejados en esta área mediante la realización de módulos tutoriales.

En la unidad de investigación de ingeniería de procesos de la universidad de Carabobo los profesores Niño y Pérez [6], crearon un programa llamado simdinUC, el cual simula procesos continuos en estado no estacionario, facilitando a estudiantes y profesores el análisis de estos sistemas sin la adquisición de un software comercial, sin embargo simdinUC no contaba con un módulo de cálculo que permitiera simular procesos por lotes, lo que colocaba al programa en desventaja con respecto a otros simuladores.

Camacho, Niño y Pérez [7], implementaron el desarrollo de un módulo de cálculo para la simulación dinámica de un reactor químico, otorgándole nuevas herramientas y aplicaciones, mejorando el dinamismo de la interfaz para el aprendizaje y la enseñanza de los diferentes procesos utilizados en la ingeniería química.

En la Universidad de Wollongong (Australia), Dharmappa, Corderoy y Hagare [8], implementaron un módulo tutorial para el aprendizaje de los procesos que revierten los daños causados al ambiente a través de la contaminación; en este se controla y evalúa la contaminación mediante aguas residuales, incorpora texto, dibujos, fotografías, animación y simulación, para que los estudiantes visualicen la problemática presentada y se facilite la comprensión de los procesos fisicoquímicos utilizados para revertir la contaminación.

En la Universidad de Campinas (Brazil) Pinto, Coselli y Wolfen [9] desarrollaron un modelo dinámico para describir el comportamiento de un reactor durante la hidrogenación de o-cresol utilizando Ni/SiO₂ como catalizador, este además permite añadir otras

reacciones fuera de las pre-programadas. Esto fue de gran importancia ya que en este tipo de procesos como los de hidrogenación u oxidación se manejan tres fases, y a pesar de que son ampliamente utilizados en la industria, no hay muchas publicaciones acerca del comportamiento de este tipo de reacciones en reactores catalíticos por lotes. Desarrollaron un módulo tutorial que permitió simular el comportamiento de las tres fases, prever el fenómeno de cambio de fase, predecir cambios de temperatura que alteraran las especificaciones del producto, entre otras condiciones de operación que puedan llegar a afectar el proceso.

Ortiz, Rennola y Bullón [10] desarrollaron un módulo tutorial para la enseñanza dinámica del control de procesos, llamado simCONTROL (simulador de control de procesos) y fue programado en MATLAB 5.3-simulink, el programa cuenta con una amplia gama de fundamentos teóricos, entre los cuales se pueden destacar los elementos básicos de control: sensores, transmisores, válvulas de control, controladores y un módulo de cálculo donde se puede visualizar la variación de un proceso de primer o segundo orden sujeto a diferentes tipos de perturbaciones.

2.3 MARCO TEÓRICO

2.3.1 Destilación

La destilación es una de los procesos de separación más importantes a nivel industrial, es una operación unitaria utilizada para separar sustancias mezcladas en fase líquida o estado de vapor, considerando la diferencia entre sus puntos de ebullición; este proceso consiste en la evaporación, condensación y la recolección de las fracciones de los compuestos [11].

La destilación se aplica a los casos en que todos los componentes están presentes en las dos fases, en vez de introducir una nueva sustancia en la mezcla, con el fin de obtener la segunda fase (como se hace en la absorción o desorción de gases) [12].

En la práctica, la destilación puede llevarse a cabo según dos métodos principales. El primer método se basa en la producción de vapor mediante la ebullición de la mezcla líquida que se desea separar y condensación de los vapores sin permitir que el líquido retorne al calderín, es decir no hay reflujo. El segundo método se basa en el retorno de una parte del condensado a la columna, en condiciones tales que el líquido que retorna se pone en íntimo contacto con los vapores que ascienden hacia el condensador, cualquiera de los dos métodos puede realizarse de forma continua o por cargas [13].

Esta se puede clasificar según [14]:

a) De acuerdo al número de componentes:

- **Binaria:** 2 componentes
- **Multicomponente:** más de 2 componentes
- **Compleja:** cuando el número y componentes individuales no están identificados como componentes, pseudo-componentes.

b) De acuerdo al tipo de separación:

- Destilación Flash.
- Destilación Diferencial.
- Destilación por Arrastre de Vapor.
- Destilación Fraccionada.

c) De acuerdo a su operación:

- Por lotes.
- Continua.
- Atmosférica.
- Al vacío.

2.3.2 Destilación Discontinua

2.3.2.1 Destilación simple o sencilla

La destilación simple es una operación en la cual se produce la vaporización de un material por la aplicación de calor; el método es empleado en la industria de capacidad moderada y pequeña, para llevar a cabo separaciones parciales de los componentes más volátiles de mezclas de líquidos miscibles. Normalmente, la mezcla líquida es cargada en lotes a un recipiente y sometida a ebullición. Los vapores que se desprenden se eliminan continuamente, se condensan y se recolectan sin permitir que tenga lugar ninguna condensación parcial ni retorno al recipiente en donde se lleva a cabo el calentamiento y ebullición de la mezcla [12].

La primera porción del destilado será la más rica en el componente más volátil y conforme continúe la destilación, el producto evaporado se va empobreciendo. Por lo tanto, el destilado puede recolectarse en varios lotes separados, llamados fracciones, obteniéndose una serie de productos destilados de diferente grado de pureza. Técnicamente el término alambique se aplica al recipiente en el que se hierven los líquidos durante la

destilación, pero a veces se aplica al aparato entero (condensador y receptor en el que se recoge el destilado) [12].

2.3.2.2 Rectificación Discontinua

Generalmente, el proceso de rectificación se realiza de forma continua; Sin embargo, para operaciones a pequeña escala, se puede emplear la rectificación discontinua o por cargas. En este tipo de rectificación, el alimento se introduce una sola vez en el calderín del equipo y durante la operación se retira de forma continua el destilado. El calor necesario para que la mezcla alcance su temperatura de burbuja y se genere la fase vapor se suministra en el calderín. La fase vapor (V) asciende a lo largo de la columna, hasta alcanzar el condensador. Parte de ese vapor condensado se extrae continuamente de la columna como producto destilado, mientras que la otra parte es devuelta a la columna como una corriente de reflujo (L_D). El reflujo líquido, rico en componente más volátil, entrará en contacto con el vapor ascendente, provocando la transferencia de materia de este componente a la corriente de vapor [15].

En las separaciones discontinuas no se alcanza el estado estacionario y la composición de la carga inicial varía con el tiempo, ya que se elimina preferentemente el componente más volátil. Esto da lugar a un aumento de la temperatura del sistema y a un progresivo empobrecimiento del producto destilado en dicho componente [15].

Los factores que determinan la operación de separación en una columna de rectificación discontinua son:

- Altura / número de pisos de la columna.
- Razón de reflujo externa.
- Composición y cantidad de carga inicial.
- Método de contacto entre las fases.

Existen dos modos de operación en una columna de destilación discontinua:

- **Recuperación de destilado de composición constante:** La relación de reflujo se va aumentando progresivamente según el residuo se empobrece en el componente más volátil, para lograr mantener constante la composición del destilado obtenido. Este tipo de operaciones exige una programación de la razón de reflujo, lo que las convierte en poco habituales [15].
- **Relación de reflujo constante:** El líquido del calderín se va empobreciendo en el componente más volátil a medida que se obtiene el producto. Por lo tanto, la riqueza del destilado disminuye, pudiendo continuar la rectificación hasta alcanzar una composición media (resultante de la mezcla de todas las fracciones recogidas) cuyo valor vendrá determinado por las especificaciones del producto que se desea conseguir [15].

En este tipo de operaciones a relación de reflujo constante en un intervalo de tiempo dt , la composición de componente más volátil en la cabeza de la columna variará una cantidad dx_D , disminuyendo desde x_D hasta $x_D - dx_D$. De esta forma, la cantidad de destilado obtenida será dD , mientras que el líquido en el calderín sufre una variación dR y su composición varía en un dx_R [15].

Tabla 1. Comportamiento de una torre de rectificación discontinua a reflujo constante.

	$t = t_0$	$t = t_0 + dt$
Cantidad total de vapor de composición x_D	0	Dd
Cantidad total de líquido de composición x_R	R	R -dR
Composición del vapor	-	x_D
Composición del liquido	x_R	$x_R - dx_R$
Cantidad del componente volátil en el vapor	-	$x_D dx_D$
Cantidad del componente volátil en el liquido	$x_R R$	$(x_R - dx_R)(R - dR)$

Fuente: Fuente elaborada en la presente investigación adaptada de [15]

Las ecuaciones representativas del proceso se deducen realizando el balance del componente más volátil retirado en ese intervalo de tiempo:

$$x_D dD = x_R R - (x_R - dx_R)(R - dR) \approx (x_R dR + dx_R R) \quad Ec.(1)$$

Despreciando el producto de las diferenciales y aplicando el balance total en la columna se obtiene que la cantidad de destilado retirada es igual a la cantidad que desaparece del calderín:

$$dD = R - (R - dR) = dR \quad Ec.(2)$$

Por tanto:

$$x_D dR = x_R dR + dx_R R$$

$$dx_R R = (x_D - x_R) dR$$

Separando variables e integrando entre R_0 (cantidad de residuo inicialmente en el calderín) y R (cantidad de residuo en cualquier instante en el calderín):

$$\frac{dR}{R} = \frac{dx_R}{(x_D - x_R)} \quad Ec.(3)$$

Integrando entre R_0 (cantidad de residuo inicialmente en el calderín) y R (cantidad de residuo en cualquier instante en el calderín):

$$\ln\left(\frac{R}{R_0}\right) = \int_{x_{R_0}}^{x_R} \frac{dx_R}{(x_D - x_R)} \quad Ec.(4)$$

El segundo miembro de esta ecuación puede integrarse representando $1/(x_D - x_R)$ frente a x_R . Esto permite calcular la proporción entre las cantidades inicial y final presentes en el calderín, para un cambio cualquiera en x_R . De este modo, también se puede calcular:

1. La cantidad de destilado producido en el tiempo de operación:

$$D = R_0 - R \quad Ec.(5)$$

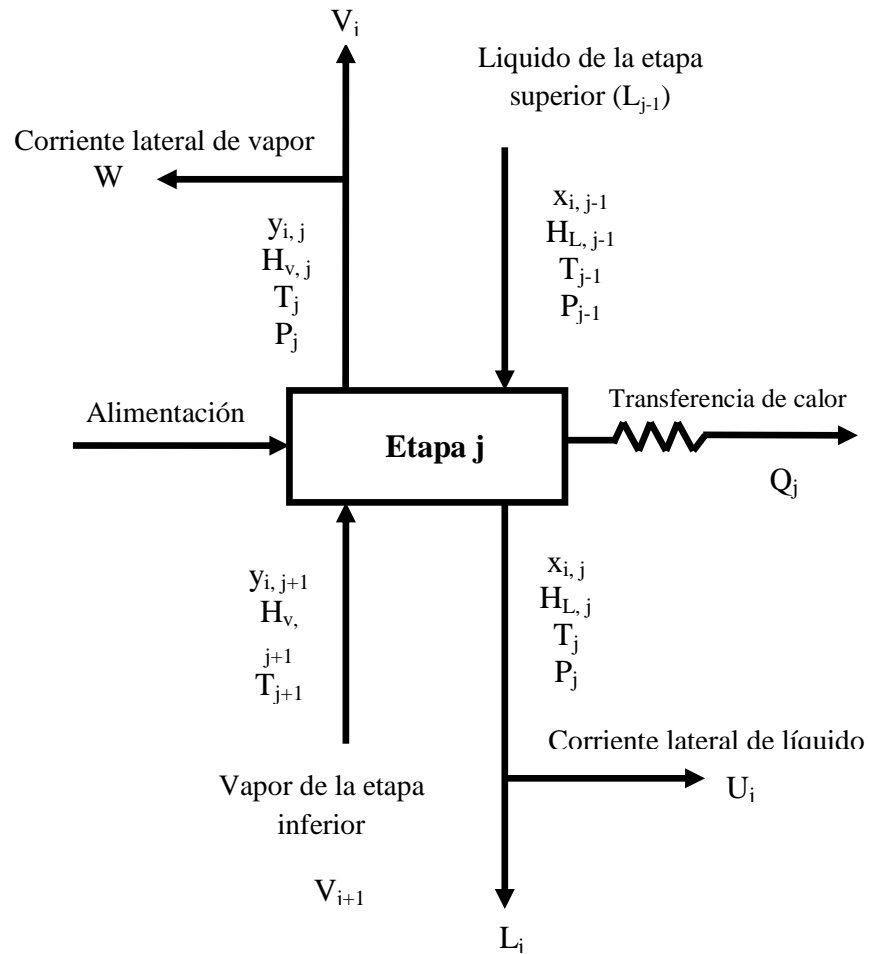
2. La composición media del destilado en el tiempo de operación:

$$\bar{x}_D = \frac{x_{R_0} R_0 - x_R R}{D} \quad \text{Ec.(6)}$$

2.3.3 Ecuaciones MESH

Para un equipo de separación líquido vapor con etapas de equilibrio en arreglo de cascada, cada etapa puede ser descrita como se observa en la Figura 1. Henley y Seader [16].

Figura 1. Representación esquemática de una etapa de equilibrio j



Fuente: Elaborada en la presente investigación adaptada de [16].

La modelación de cada etapa de equilibrio j puede realizarse mediante un conjunto de ecuaciones, las cuales relacionan las variables que determinan el comportamiento del equipo. Estas son conocidas como ecuaciones MESH.

2.3.3.1 Ecuaciones MESH en estado estable

- **Ecuaciones M:** refiere a los balances de materia para cada componente.

$$M_{i,j} = L_{j-1}x_{i,j} + V_{j+1}y_{j+1} + F_jz_{i,j} - (L_j + U_j)x_{i,j} - (V_j + W_j)y_{i,j} = 0 \quad Ec.(7)$$

- **Ecuaciones E:** Alude a las relaciones de equilibrio entre fases para cada componente.

$$E_{i,j} = y_{i,j} - K_{i,j}x_{i,j} = 0 \quad Ec.(8)$$

- **Ecuaciones S:** Representa las sumatorias de las fracciones molares (una para cada etapa)

$$(S_y)_j = \sum_{i=1}^c y_{i,j} - 1 = 0 \quad Ec.(9)$$

- **Ecuaciones H:** Representa los balances de energía etapa a etapa.

$$H_j = L_{j-1}H_j + V_{j+1}H_{j+1} + F_jH_{Fj} - (L_j + U_j)H_{Lj} - (V_j + W_j)H_{Vj} - Q_j = 0 \quad Ec.(10)$$

Por tanto se tienen C ecuaciones M y E por etapa, para las S y H solo se requerirá una.

De un balance general mezclando las ecuaciones E y $\sum z_{i,j} = 1$, se obtiene la expresión [10]:

$$L_j = V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - U_m - W_m) - V_i \quad Ec.(11)$$

Dónde:

$$K_{i,j} = K_{i,j}(T_j, P_j, x_j, y_j; i = 1, 2, 3, \dots, c) \quad Ec.(12)$$

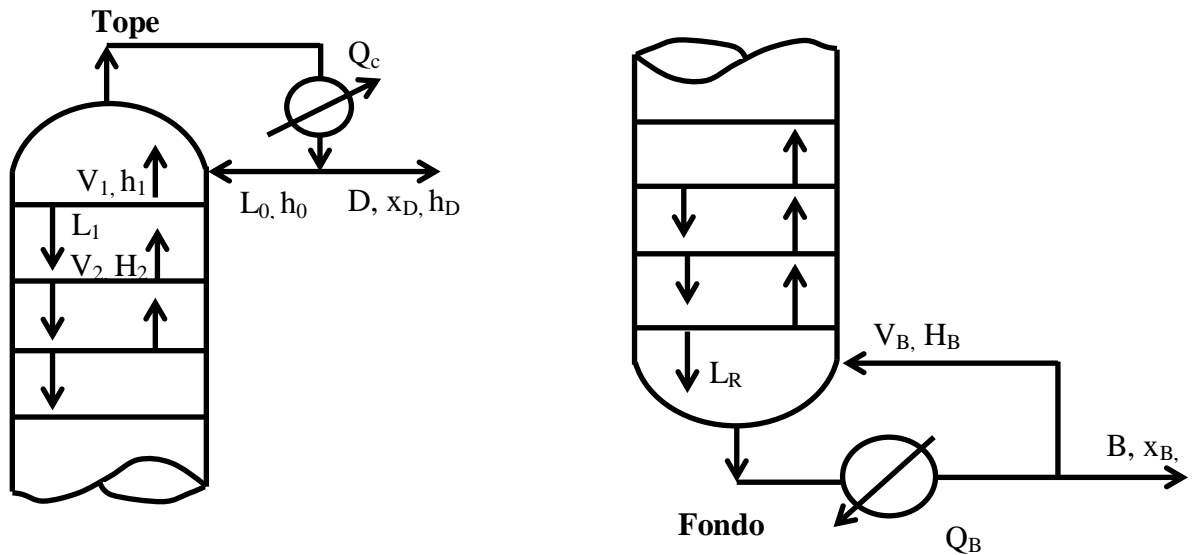
$$H_{L_j} = H_{L_j}(T_j, P_j, x_{i,j}; i = 1, 2, 3, \dots, c) \quad Ec.(13)$$

$$H_{V_j} = H_{V_j}(T_j, P_j, y_{i,j}; i = 1, 2, 3, \dots, c) \quad Ec.(14)$$

2.3.3.2 Ecuaciones MESH en estado dinámico

Las ecuaciones E y S son las mismas para el estado estable y dinámico, sin embargo las ecuaciones M y H varían con respecto al tiempo [16].

Figura 2.Esquema del tope y fondo de una columna de destilación.



Fuente: Elaborada en la presente investigación.

Ecuaciones de balance de materia (M)

Para un plato j

$$M_j \frac{d(x_{i,j}(t))}{dt} = L_{j-1}x_{i,j} + V_{j+1}y_{j+1} - (L_j + U_j)x_{i,j} - (V_j + W_j)y_{i,j} \quad Ec.(15)$$

Tope

$$M_D \frac{d(x_D(t))}{dt} = V_1(y_2 - x_1) \quad Ec.(16)$$

Fondo

$$M_B \frac{d(x_B(t))}{dt} = Fx_f + L_R x_{N-1} - V_B y_B - Bx_B \quad Ec.(17)$$

Ecuaciones de balance energía (H)

Para un plato j

$$M_j \frac{d(H_j(t))}{dt} = L_{j-1}H_j + V_{j+1}H_{j+1} - (L_j + U_j)H_{Lj} - (V_j + W_j)H_{Vj} \quad Ec.(18)$$

Tope

$$M_D \frac{d(h_D(t))}{dt} = L_0h_0 + V_2H_2 - L_1h_1 - V_1h_1 - Q_c \quad Ec.(19)$$

Fondo

$$M_B \frac{d(h_B(t))}{dt} = L_Rh_{N-1} - V_1h_1 - V_BH_B + Q_B + Fh_f \quad Ec.(20)$$

2.4 ALGORITMO DE THOMAS

Según Henley y Seader [16], este es un método gaussiano de eliminación en el que se procede inicialmente a una eliminación progresiva comenzando en la etapa 1 y operando hasta alcanzar la etapa N, el algoritmo inicia obteniendo las ecuaciones M modificadas por medio de la sustitución de la Ec.(8) en la Ec.(7) para eliminar y, se prosigue sustituyendo la ecuación del balance de materia total en la Ec.(7) con el fin de eliminar L. De esta forma las ecuaciones para el cálculos de y y L se separan de las otras ecuaciones. Se obtiene así la siguiente ecuación para cada componente y etapa, donde se ha omitido el subíndice i para los términos B, C y D.

$$A_j x_{i,j-1} + B_j x_{i,j} + C_j x_{i,j+1} = D_j \quad Ec.(21)$$

Dónde:

$$A_j = V_j + \sum_{m=1}^j (F_m - U_m - W_m) - V_1, \quad 2 \leq j \leq N \quad Ec.(22)$$

$$B_j = -[V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - U_m - W_m) - V_1 + (V_j + W_j)K_{i,j}], \quad 1 \leq j \leq N \quad Ec.(23)$$

$$C_j = V_{j+1} K_{i,j+1}, 1 \leq j \leq N-1 \quad \text{Ec.}(24)$$

$$D_j = -F_j z_{i,j}, 1 \leq j \leq N-1 \quad \text{Ec.}(25)$$

Con $x_{i,0}=0$, $V_{N+1}=0$, $W_1=0$ y $U_N=0$, si las ecuaciones M modificadas se agrupan por componentes, pueden separarse escribiéndolas como una serie de C ecuaciones separadas en la matriz tridiagonal, donde la variable de salida para cada ecuación matricial es la composición x, para toda la cascada en contracorriente de N etapas. [16].

$$\begin{bmatrix} B_1 & C_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ A_2 & B_2 & C_2 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & A_3 & B_3 & C_3 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & & & & & & \dots & \dots \\ \dots & & & & & & & \dots & \dots \\ \dots & & & & & & & \dots & \dots \\ \dots & & & & & & & \dots & \dots \\ \dots & & & & & & & \dots & \dots \\ \dots & & & & & & & \dots & \dots \\ 0 & \dots & & & 0 & A_{N-2} & B_{N-2} & C_{N-2} & 0 \\ 0 & \dots & & & 0 & 0 & A_{N-1} & B_{N-1} & C_{N-1} \\ 0 & \dots & & & 0 & 0 & 0 & A_N & B_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{i,1} \\ x_{i,2} \\ x_{i,3} \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ x_{i,N-2} \\ x_{i,N-1} \\ x_{i,N} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ D_{N-2} \\ D_{N-1} \\ D_N \end{bmatrix} \quad \text{Ec.}(26)$$

Las constantes Bj y Cj para cada componente dependen exclusivamente de las variables de tanteo T y V con tal de que los valores de K sean independientes de la composiciones obtenidas en la iteración previa pueden utilizarse para estimar los valores K [16].

Para la resolución del algoritmo de Thomas se procede a una eliminación progresiva comenzando en la etapa 1 y operando hasta alcanzar la etapa N, aislando finalmente $x_{i,N}$. Se obtienen así otros valores de $x_{i,j}$ comenzando con $x_{i,N-1}$, mediante una substitución por el camino inverso [16].

Las ecuaciones utilizadas en el algoritmo de Thomas son las siguientes: para la etapa 1, la Ec.(27) es de la forma $B_i x_{i,1} + C_1 x_{i,2} = D_1$, y puede resolverse para $x_{i,1}$, en función de $x_{i,2}$ para dar:

$$x_{i,1} = \frac{D_1 - C_1 x_{i,2}}{B_1}$$

Haciendo el cambio de variable:

$$p_1 = \frac{C_1}{B_1} \text{ y } q_1 = \frac{D_1}{B_1}$$

Entonces:

$$x_{i,1} = q_1 - p_1 x_{i,2} \quad \text{Ec.(27)}$$

Por tanto los coeficientes de la matriz se transforman en $B_1 \leftarrow 1$, $C_1 \leftarrow p_1$, $D_1 \leftarrow q_1$, donde \leftarrow quiere decir “reemplazado por”. Solo se necesitan conservar los valores p_1 y q_1 .

Para la etapa 2, la Ec.(21) puede combinarse con Ec.(27) y resolverse para $x_{1,2}$, obteniéndose:

$$x_{1,2} = \frac{D_2 - A_2 q_1}{B_2 - A_2 p_1} - \left(\frac{C_2}{B_2 - A_2 p_1} \right) x_{i,3}$$

Tomando

$$q_2 = \frac{D_2 - A_2 q_1}{B_2 - A_2 p_1} \quad \text{y} \quad p_2 = \frac{C_2}{B_2 - A_2 p_1}$$

Resulta:

$$x_{i,2} = q_2 - p_2 x_{i,3}$$

De esta forma $A_2 \leftarrow 0$, $B_2 \leftarrow 1$, $C_2 \leftarrow p_2$ y $D_2 \leftarrow q_2$, solo se necesitan conservar los valores de p_2 y q_2 .

De forma general, podemos definir

$$p_j = \frac{C_j}{B_j - A_j p_{j-1}} \quad \text{Ec.(28)}$$

$$q_j = \frac{D_j - A_j q_{j-1}}{B_j - A_j p_{j-1}} \quad \text{Ec.}(29)$$

Por tanto,

$$x_{i,j} = q_j - p_j x_{i,j} \quad \text{Ec.}(30)$$

Donde $A_j \leftarrow 0$, $B_j \leftarrow 1$, $C_j \leftarrow p_j$ y $D_j \leftarrow q_j$, solo se necesitan conservar los valores de p_j y q_j . De esta forma, partiendo de la etapa 1, se van calculando de forma progresiva los valores de p_j y q_j en el siguiente orden: $p_1, q_1, p_2, q_2, \dots, p_{N-1}, q_{N-1}, q_N$. En la etapa N, la ecuación Ec.(30) así la $x_{i,N}$ como:

$$x_{i,N} = q_N \quad \text{Ec.}(31)$$

Se calculan entonces a partir de Ec.(30) valores sucesivos de x , substituyendo a lo largo del camino inverso en la forma:

$$x_{i,j-1} = q_{j-1} - p_{j-1} x_{ij} = r_{j-1} \quad \text{Ec.}(32)$$

La Ec.(32) corresponde a la matriz de coeficientes de identidad.

La utilización del algoritmo de Thomas en esta forma evita la recomposición de errores de ruptura en el programa debido a que, por lo general, no aparecen diferencias entre cantidades casi iguales. Además, los valores calculados de x son casi siempre positivos. El algoritmo es de una elevada eficacia, requiere una mínima cantidad de memoria en el ordenador, tal como ha podido apreciarse anteriormente, y es superior a las rutinas alternativas de inversión de matrices.

2.5 MÉTODO DE PUNTO DE BURBUJA O ALGORITMO DE WANG-HENKE

Se denomina como método de punto de burbuja (BP), Henley y Seader [16], dado que en cada iteración se calcula un nuevo conjunto de temperaturas de las etapas a partir de las ecuaciones del punto de burbuja. En este método las ecuaciones son separadas y resueltas de forma secuencial, excepto las ecuación M modificadas, que se resuelven de forma separada para cada componente por el método de la matriz tridiagonal.

En la Figura 3, se muestra el algoritmo para el método BP de Wang-Henke. Para iniciar los cálculos se asignan valores a las variables de tanteo. En la mayoría de los problemas es suficiente con establecer un conjunto inicial de valores V_j basados en la suposición de flujos molares constantes interetapas, utilizando los flujos de destilado, alimentación, reflujo y corrientes laterales especificados. Por lo general, se puede obtener un conjunto inicial adecuado de valores T_j calculando o suponiendo tanto la temperatura del punto de burbuja de un producto de colas estimado, como la temperatura de rocío de un producto de vapor destilado; o bien calculando o suponiendo la temperatura del punto de burbuja, si el destilado es líquido, o una temperatura comprendida entre las de burbuja, y rocío en el caso de que el destilado sea una mezcla (vapor y líquido); y procediendo después a determinar la temperatura del resto de las etapas admitiendo una variación lineal de la temperatura con la localización de las etapas.

Los valores y se determinan juntamente con el cálculo de temperatura de las etapas utilizando las ecuaciones E. las entalpías molares para cada corriente de líquido y vapor que abandonan una etapa se calculan a partir de un conjunto consistente de valores de x_{ij} , T_j y y_{ij} . Puesto que F_1 , V_1 , U_1 , W_1 y L_1 están especificadas, V_2 se obtiene de forma inmediata la Ec.(11), la cantidad de calor suministrada por el rehervidor se calcula por:

$$Q_N = \sum_{j=1}^N (F_j H_{Fj} - U_j H_{Lj} - W_j H_{Vj}) - \sum_{j=1}^{N-1} Q_j - V_j H_{Vj} - L_N H_{LN} \quad \text{Ec.}(33)$$

Se calcula un nuevo conjunto de variables de tanteo V_j mediante la aplicación del siguiente balance de energía modificado, obteniendo por combinación de *Ec.*(10) y *Ec.*(11) dos veces para eliminar L_{j-1} y L_j . una vez reordenando

$$\alpha_j V_j + \beta_j V_{j+1} = \gamma_j \quad \text{Ec.}(34)$$

Dónde:

$$\alpha_j = H_{L_{j-1}} - H_{V_j} \quad \text{Ec.}(35) \quad \beta_j = H_{V_{j+1}} - H_{L_j} \quad \text{Ec.}(36)$$

$$\gamma_j = \left[\sum_{m=1}^{j-1} (F_m - W_m - U_m) - V_j \right] (H_{L_j} - H_{L_{j-1}}) + F_j (H_{L_j} - H_{F_j}) + W_j (H_{V_j} - H_{L_j}) + Q_j \quad \text{Ec.}(37)$$

Las entalpias se evalúan para las últimas temperaturas calculadas de las etapas, en vez de las utilizadas al iniciar la iteración La *Ec.*(28) escrita en forma de matriz di-diagonal, aplicada a las etapas comprendidas entre 2 y N-1 es

$$\begin{bmatrix} \beta_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \alpha_3 & \beta_3 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \alpha_4 & \beta_4 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & & & & & & \dots & \dots \\ \dots & & & & & & & \dots & \dots \\ \dots & & & & & & & \dots & \dots \\ \dots & & & & & & & \dots & \dots \\ \dots & & & & & & & \dots & \dots \\ \dots & & & & & & & \dots & \dots \\ 0 & \dots & & & 0 & \alpha_{N-3} & \beta_{N-3} & 0 & 0 & V_{N-2} & \gamma_{N-3} \\ 0 & \dots & & & 0 & 0 & \alpha_{N-2} & \beta_{N-2} & 0 & V_{N-1} & \gamma_{N-2} \\ 0 & \dots & & & 0 & 0 & 0 & \alpha_{N-1} & \beta_{N-1} & V_N & \gamma_{N-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma_2 - \alpha_2 V_2 \\ \gamma_3 \\ \gamma_4 \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \gamma_{N-3} \\ \gamma_{N-2} \\ \gamma_{N-1} \end{bmatrix} \quad \text{Ec.}(38)$$

La ecuación matricial se resuelve de forma inmediata, comenzando a resolverse por la ecuación superior donde V_2 es conocida, y operando hacia abajo en la misma forma, apoyándose en los resultados anteriores. Esto es:

$$V_3 = \frac{\gamma_2 - \alpha_2 V_2}{\beta_2} \quad \text{Ec.(39)}$$

$$V_4 = \frac{\gamma_3 - \alpha_3 V_3}{\beta_3} \quad \text{Ec.(40)}$$

O, en general

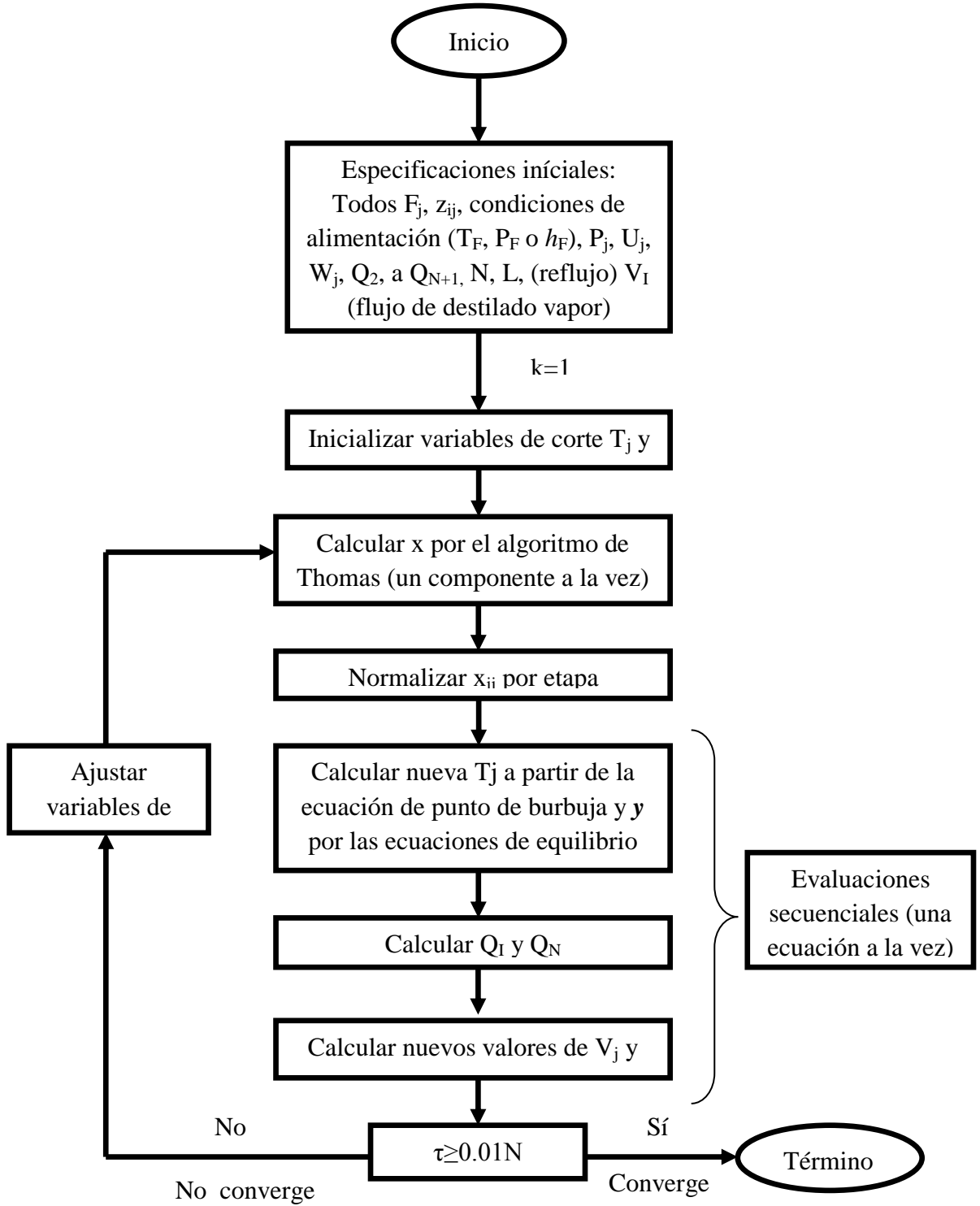
$$V_j = \frac{\gamma_{j-1} - \alpha_{j-1} V_{j-1}}{\beta_{j-1}} \quad \text{Ec.(41)}$$

y así hasta el final. Los correspondientes flujos de líquido se obtienen de Ec.(10) se considera que el método de resolución ha convergido cuando:

$$\tau = \sum_{j=1}^N \left[T_j^{(k)} - T_j^{(k-1)} \right]^2 \leq 0.01N \quad \text{Ec.(42)}$$

Esta tolerancia fue propuesta por Wang y Henke y resulta muy adecuado.

Figura 3. Algoritmo del método del punto de burbuja (Wang-Henke)



Fuente: Elaborado en la presenta investigación adaptada de Henley y Seader [16].

2.6 MÉTODO DE RUNGE-KUTTA DE CUARTO ORDEN

Este es el método iterativo más utilizado, para resolver problemas numéricos de ecuaciones diferenciales ordinarias con condiciones iniciales, proporciona un pequeño margen de error con respecto a la solución real del problema, Alfaro [17]. Existen varios métodos Runge-Kutta de 4° orden. Entre los cuales se encuentra el Runge-Kutta-Gill en que se minimiza la memoria utilizada, el Runge-Kutta-Ralston en el que se minimiza el error por truncamiento, el Runge-Kutta-Merson que es una extensión para hacerlo de paso variable, a costa de una evaluación adicional de las ecuaciones del sistema para poder estimar el error y tomar decisiones sobre el tamaño del paso, y otros más.

El método de Runge-Kutta de cuarto orden, es el utilizado con más frecuencia en la simulación de los sistemas dinámicos, y sus ecuaciones son:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}[k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4] \quad \text{Ec.}(43)$$

Dónde:

$$k_1 = \Delta t \cdot f(y_n, t_n) \quad \text{Ec.}(44)$$

$$k_2 = \Delta t \cdot f\left(y_n + \frac{1}{2}k_1, t_n + \frac{1}{2}\Delta t\right) \quad \text{Ec.}(45)$$

$$k_3 = \Delta t \cdot f\left(y_n + \frac{1}{2}k_2, t_n + \frac{1}{2}\Delta t\right) \quad \text{Ec.}(46)$$

$$k_4 = \Delta t \cdot f(y_n + k_3, t_n + \Delta t) \quad \text{Ec.}(47)$$

La solución se da en el intervalo $(t_0, t_0 + h_n)$ [17].

2.7 MODELO TERMODINAMICO UNIFAC

UNIFAC, es uno dentro de un conjunto de métodos conocidos como métodos de contribución de grupos. Estos métodos surgieron como consecuencia de la necesidad de hacer estimaciones de propiedades termodinámicas en casos en los que no se cuenta con ningún dato experimental. La idea sustantiva de estos métodos es que una molécula se puede considerar como la suma de todos los grupos que la integran Godoy y Rodríguez [18].

El Modelo considera, que la energía de Gibbs está formada por dos partes aditivas, Smith y Vann Ness [19], un término combinatorio g^c el cual, toma en cuenta el tamaño molecular y las diferencias de forma, y un término residual g^R que toma en cuenta las interacciones moleculares, por lo tanto:

$$g \equiv g^c + g^R \quad \text{Ec.}(48)$$

El coeficiente de actividad se calcula empleando la siguiente expresión:

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_i^c + \ln \gamma_i^R \quad \text{Ec.}(49)$$

Dónde:

$$\ln \gamma_i^c = 1 - J_i + \ln J_i - 5q_i \left(1 - \frac{J_i}{L_i} + \ln \frac{J_i}{L_i} \right) \quad \text{Ec.}(50)$$

$$\ln \gamma_i^R = q_i \left[1 - \sum_k \left(\theta_k \frac{\beta_{ik}}{s_k} - e_{ki} \ln \frac{\beta_{ik}}{s_k} \right) \right] \quad \text{Ec.}(51)$$

La función g^c contiene únicamente parámetros de especie pura, mientras que la función g^R incorpora dos parámetros binarios para cada par de moléculas. A las unidades estructurales que conforman una molécula, se les denomina sub-grupos, un número designado k , identifica cada sub-grupo, el volumen relativo R_k y el área superficial relativa Q_k , son propiedades de los sub-grupos (véase Anexo D). Para la mezcla etanol agua la solución está constituida por 2 componentes (n_c) y 4 sub-grupos (n_g) [19].

2.8 MODELO TERMODINAMICO PSRK

La ecuación de estado PSRK (Predictive Soave Redlich Kwong), Carrero [20], se basa en la modificación de Soave de la ecuación de estado cúbica de Redlich-Kwong con una regla de mezclado predictiva basada en el modelo UNIFAC de coeficientes de actividad. La principal ventaja de PSRK es que permite predecir el equilibrio líquido-vapor para un gran número de sistemas sin incluir nuevos parámetros, que se tendrían que (los cuales basarían su obtención en datos) obtener de datos experimentales. PSRK ha sido desarrollada desde 1991 incluyendo parámetros para gases ligeros, predicción de equilibrios líquido-vapor y solubilidades de gases, a altas y bajas temperaturas, e incluyendo sistemas con compuestos polares y mezclas asimétricas. La expresión de PSRK para P es la misma de la ecuación SRK original.

$$P = \frac{RT}{\hat{V}} - \frac{a}{\hat{V}(\hat{V} + b)} \quad \text{Ec.}(52)$$

Para el desarrollo de la ecuación de estado PSRK se necesita la temperatura crítica y presión, adicionalmente también es el factor acéntrico para todos los componentes puros de la mezcla. La integridad del modelo se puede mejorar si el factor acéntrico se sustituye para calcular las constantes de Mathias-Copeman. PSRK tiene todas las ventajas de una ecuación de estado, Fischer y Horstmann [21]. Se puede aplicar a los sistemas con componentes súpercríticos y permite el cálculo de las densidades, entalpías y otras propiedades incluso en sistemas con componentes polares. Otra aplicación de PSRK es la predicción de líneas críticas de mezclas. Especialmente en el caso de que no hay o hay muy pocos datos de alta presión disponibles EVL datos críticos se pueden utilizar para mejorar los parámetros de grupo PSRK interacción.

3. METODOLOGIA

3.1 TIPO DE INVESTIGACION

En el presente proyecto se desarrolló una investigación de tipo mixta (evaluativa-experimental) con una duración de 20 meses. Se creó un módulo tutorial donde se implementó el modelado matemático y simulación de una columna de destilación a escala piloto ubicada en el Laboratorio de Operaciones Unitarias del Programa de Ingeniería Química en la Universidad de Cartagena. Se evaluó el comportamiento de la torre a diferentes condiciones de operación, para predecir los perfiles de concentraciones de la mezcla utilizada (etanol-agua), las temperaturas de equilibrio y los flujos de líquido y vapor etapa a etapa; con el fin de garantizar la validez de los modelos utilizados, la simulación se contrastó con datos experimentales obtenidos de la torre.

3.2 TECNICAS DE RECOLECCIÓN DE INFORMACIÓN

3.2.1 Fuentes de información primaria

En esta investigación las fuentes primarias de información la constituyen los perfiles de concentración de etanol en la fase líquida, obtenidos experimentalmente en la torre de destilación a escala piloto, estos son requeridos para la validación del modelo matemático empleado.

3.2.2 Fuentes de información secundaria

Estas fuentes están compuestas por las bases de datos de la Universidad de Cartagena, Science direct, American Chemical Society (ACS), Scopus, Scielo y Scirus, las cuales suministraron los artículos bases para el desarrollo de la investigación; los libros Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química, Manual del Ingeniero Químico y Operaciones de Separación por etapas en equilibrio en Ingeniería Química proporcionaron los algoritmos, datos de equilibrio y métodos de solución utilizados en el presente trabajo.

3.3 VARIABLES

3.3.1 Variables Independientes

El conjunto de variables independientes manejadas fueron: tiempo (t), relación de reflujo (LD) y composición de alimentación (z), puesto que estas no se ven alteradas por otras variables o factores incidentes en el proceso, además afectan de manera directa la separación de la mezcla etanol - agua en la destilación.

3.3.2 Variables Dependientes

La variación de los perfiles de concentración de etanol en la fase líquida con respecto al tiempo y a cada etapa en equilibrio, corresponde a la variable dependiente, los cuales fueron calculados mediante la implementación de las ecuaciones MESH, el método de Runge-Kutta de cuarto orden y los algoritmos de Thomas y Wank - Henke combinados.

3.3.3 Variables Intervinientes

Las variables intervinientes en el proceso de destilación discontinua de la mezcla etanol – agua corresponden, a la variación con respecto al tiempo de los calores suministrado y retirado por el rehornador y condensador respectivamente, además de la temperatura y los flujos de líquido y vapor en cada una de las etapas.

Tabla 2.Operacionalización de las variables

Tipo de Variable	Variable	Definición	Indicador
Independiente	Tiempo	Tiempo de corrida de la simulación.	Minutos
	Relación de Reflujo	Moles de mezcla recirculadas por moles de destilado.	Adimensional
	Composición de Alimento	Fracción molar de etanol en la alimentación.	Adimensional
Dependiente	Concentración de etanol	Variación de la composición de etanol en fase líquida.	Adimensional
Interviniente	Calor del rehornador y Condensador	Energía calórica suministrada y retirada respectivamente a la torre.	kJ/mol
	Temperatura	Temperatura de saturación en cada etapa.	K
	Flujo de vapor y líquido	Flujo de vapor ascendente y líquido descendente en cada etapa.	mol/min

Fuente: elaborada en la presente investigación.

3.4 PROCEDIMIENTO

3.4.1 Equipos

3.4.1.1 Columna de destilación de platos perforados

El equipo simulado y empleado (ilustrado en la Figura 4), para la validación del modelo matemático desarrollado en el presente trabajo, se encuentra en el Laboratorio de Operaciones Unitarias de la Universidad de Cartagena, es una columna de destilación fraccionada a escala piloto fabricada en vidrio boro-silicato con diámetro nominal de 2 pulgadas, posee 5 platos perforados hechos en PTFE (politetrafluoroetileno) de 12 cm cada uno, conformando una altura de columna de 60 cm, sostenida por una estructura de aluminio reforzado de tipo industrial, compuesta de una unidad de proceso y un gabinete de control, ambas unidades están interconectadas formando una sola instalación [22].

Esta columna también dispone de:

- Un rehervidor con capacidad de 5 litros de mezcla, fabricado en vidrio boro-silicato, con válvula de vaciado y mantilla de calentamiento eléctrico.
- Sistema de tubería para agua de enfriamiento fabricado en PVC cedula 80 tipo industrial y accesorios fabricados en acero inoxidable y PTFE.
- Rotámetro para medición de flujo de agua de enfriamiento con capacidad de 30 a 300 litros/hora.
- Sensores de temperatura en cuatro secciones del proceso.
- Condensador fabricado en vidrio boro-silicato tipo serpentín, con regulación de flujo de agua de enfriamiento.
- Cabezal de reflujo fabricado en vidrio boro-silicato, de 20 cm de altura acoplado al plato superior de la columna.
- Válvulas para toma de muestra en diferentes secciones de la columna.
- Sistema de reflujo con válvulas manuales de retorno y obtención de producto.
- Condensador de producto destilado, con regulación de flujo de agua de enfriamiento.

- Recibidor de vidrio para producto destilado fabricado en vidrio borosilicato, con capacidad de un litro y válvula para toma de muestra en el recipiente de producto.

Dispone, además de un gabinete de control tipo industrial NEMA 4X, con cuatro Indicadores digitales de temperatura con posibilidad de conexión a interface tipo RS-485, control de calentamiento de resistencias en hervidor, por medio de perilla reguladora, botón de marcha y paro de resistencia de calentamiento con indicador luminoso verde y rojo respectivamente, protectores termomagnéticos para resistencias, indicador luminoso amarillo de tablero energizado, portafusibles de protección e interruptor general. [22].

Figura 4. Torre de destilación a escala piloto



Fuente: Elaborada en la presente investigación

3.4.1.2 Espectrofotómetro

En la Figura 5 se visualiza el espectrofotómetro UV-VIS (UV-VIS Scanning Spectrophotometer. Model: Spectro UV -2650. Marca: LABOMED, INC), utilizado para medir la adsorbancia de las muestras de etanol-agua. Este ofrece mayor facilidad de uso, precisión y exactitud resultante en el tiempo y ahorro de costes, este modelo tiene un alto rendimiento y fiabilidad, posee una gama visible de 190-1100 nm y un ancho de banda de 2nm, puede usar 100 mm células con su celda titular, además el usuario puede almacenar datos o parámetros [23].

Figura 5.Espectrofotómetro UV-VIS



Fuente: Elaborada en la presente investigación

3.4.2 Materiales y métodos

La simulación y la construcción del módulo tutorial, se desarrolló en la plataforma de programación MATLAB, utilizando la herramienta Guide para la elaboración de la interfaz gráfica. Los métodos que describen el sistema en estado estable (operando a reflujo total) fueron los algoritmos de Thomas y Wang – Henke, extraídos de Henley y Seader [16]; los modelos termodinámicos empleados para el cálculo de entalpías, presiones y temperaturas

de saturación, se obtuvieron de McCabe y Smith [13], los métodos UNIFAC y PSRK que modelan el equilibrio químico de la mezcla etanol – agua, se obtuvieron de [18, 19] y [20, 21] respectivamente. Una vez obtenidas las condiciones iniciales, se implementó el método de Runge-Kutta de cuarto orden, para generar los perfiles de concentración de etanol en fase líquida en función del tiempo.

Los modelos matemáticos implementados y desarrollados que describen el comportamiento del sistema, se validaron realizando pruebas experimentales y simulaciones a las mismas condiciones de operación, contrastando los datos obtenidos para establecer la confiabilidad de los modelos, para ello fue requerido etanol al 96% V/V (marca Pro Quimar), agua destilada, envases para recolección de muestras, agitadores de vidrio, probetas y beakers.

3.4.3 Diseño Experimental

Para validar el modelo desarrollado se diseñó un experimento de tipo comparativo simple. Las variables que más influyen en el proceso de separación y por tanto en la variable dependiente, son la composición de alimento y la relación de reflujo, la torre de destilación a escala piloto permite la variación de esta última en dos niveles (reflujo total y sin reflujo), mientras que la composición de alimentación puede oscilar en un intervalo de 0 a 1 ($0 < z < 1$). Se trabajó con composiciones de 0.15, 0.25, 0.35 y 0.40.

Tabla 3. Diseño experimental

	Datos Experimentales								Datos Simulados							
	Reflujo total				Sin reflujo				Reflujo total				Sin reflujo			
	0.15	0.25	0.35	0.40	0.15	0.25	0.35	0.40	0.15	0.25	0.35	0.40	0.15	0.25	0.35	0.40
t ₀																
t ₁																
t ₂																
t ₃																
t ₄																
t ₅																
t ₆																
t ₇																
t ₈																

Fuente: Elaborada en la presente investigación

3.4.4 Procedimiento Experimental

Los experimentos realizados para validar los modelos matemáticos implementados y desarrollados en la presente investigación, se enuncia en los siguientes pasos:

1. Se hizo circular agua por el sistema de enfriamiento y tuberías para desalojar los residuos acumulados y evitar agrietamiento de la estructura del equipo por el choque térmico.
2. Se aseguraron las conexiones y mangueras para evitar fugas.
3. Se abrió la válvula de alimentación para hacer circular agua por los serpentines de la torre.
4. Se colocó la mezcla en el domo de calentamiento, de composición molar 0.15 en etanol hasta completar 5 litros.
5. Se encendieron los controles de las resistencias para proceder al calentamiento de la mezcla en el rehervidor.
6. Se esperó hasta que la columna se estabilizara operando a reflujo total.
7. Una vez alcanzado el estado estable, se tomaron 3 muestras diferentes en los platos 1,3 y 5 de la torre cada 10 minutos.
8. Se cerró la llave de reflujo, para operar sin retorno de destilado a la torre.
9. Se esperaron 5 minutos mientras se estabilizaba el flujo de destilado.
10. Durante un minuto se recolecto destilado, para cuantificar el flujo de salida de producto.
11. La operación de la torre, continuo hasta que se tomaron 9 muestras diferentes durante cada 10 minutos, en el recipiente de producto destilado y en los platos 1,3 y 5.
12. Una vez completado el proceso de separación y muestreo, se disminuyó el valor de los diales de la resistencia a off, manteniendo el agua de refrigeración circulando por la torre para ayudar a disipar el calor.
13. Una vez enfriado y apagado el equipo se vació completamente el sistema.
14. Se repitieron los pasos del 4 al 13, para las composiciones molares de alimentación de 0.25, 0.35 y 0.4.

15. Luego de obtener las muestras, se programó el espectrofotómetro, para establecer la longitud de onda a la cual se detectaba la presencia de etanol, lo cual se logró haciendo un barrido entre 200 y 500 nm, obteniendo un pico a los 345 nm.
16. Se construyó la curva de calibración para determinar la composición molar de las muestras obtenidas, empleando etanol al 99.9% P/P y midiendo las absorbancias de las diluciones preparadas, de cero a 100% V/V.
17. Se midieron las absorbancias de todas las muestras recolectadas, y con ayuda de la curva de calibración, se determinó la composición de las mismas.

3.5 MODELADO MATEMATICO

La torre de destilación a escala piloto, es de tipo rectificación discontinua, por consiguiente la descripción de su comportamiento está dado por las ecuaciones 1 a 6, lo cual solo da a conocer las composiciones en el tope y fondo, sin embargo para mayor exactitud y descripción de las variables a lo largo de la columna, se optó por la implementación de las ecuaciones MESH en estado estable y dinámico para la modelación de la torre de destilación, como se describe a continuación.

3.5.1 Consideraciones generales del modelo matemático

- Se consideró que la torre de destilación a escala piloto se encuentra en estado estable cuando opera a reflujo total y a esta condición se calculan los valores iniciales.
- Cuando la torre de destilación trabaja sin reflujo los perfiles de concentración en las etapas varían con respecto al tiempo.
- La fase líquida y vapor que abandonan el plato se encuentran en equilibrio termodinámico.
- El líquido en el plato está completamente mezclado y no es compresible, así que no existen gradientes de concentración radiales en la columna. Esta suposición se cumple a la perfección en columnas pequeñas.

- El vapor no arrastra líquido hacia el plato superior.
- El vapor tiene una concentración uniforme, es decir no hay gradientes de concentración radiales y este se considera incompresibles.
- No hay diferencia de presión en la columna, esto se debe a que la torre de destilación trabaja a presión atmosférica.
- No hay acumulación de vapor en el sistema.
- Las pérdidas de calor a través del cuerpo de la columna son despreciables.
- El condensador de la torre de destilación es total, es decir que todo el vapor que ingresa al condensador se condensa y la composición en este es igual al de reflujo y al destilado.
- No hay reacción química.

El modelo matemático desarrollado se basa en el concepto de etapa de equilibrio, inicialmente describe el comportamiento de la torre de destilación a escala piloto en estado estable (operando a reflujo total), las ecuaciones MESH y los algoritmos de Thomas y Wang - Henke acoplados, proporcionan los valores iniciales para calcular los perfiles de concentración de etanol, temperaturas y flujos de vapor y líquido etapa a etapa.

Para modelar la columna en estado estable se usaron las (Ec. 7) y (Ec. 10) en cada etapa, donde los términos U_j y W_j fueron iguales a cero y la alimentación se realizó en el rehervidor. La predicción del comportamiento dinámico (operando sin reflujo), se lleva a cabo utilizando el método de Runge - Kutta de cuarto orden, el cual resuelve las siguientes ecuaciones diferenciales:

Condensador

$$\frac{d}{dt} [M_1 x_{i,1}(t)] = V_2 (y_{i,2} - x_{i,1}) \quad \text{Ec. (53)}$$

Plato 1

$$\frac{d}{dt} [M_2 x_{i,2}(t)] = L_1 x_{i,1} + V_3 y_{i,3} - L_2 x_{i,2} - V_2 y_{i,2} \quad \text{Ec. (54)}$$

Plato 2

$$\frac{d}{dt} [M_3 x_{i,3}(t)] = L_2 x_{i,2} + V_4 y_{i,4} - L_3 x_{i,3} - V_3 y_{i,3} \quad Ec.(55)$$

Plato 3

$$\frac{d}{dt} [M_4 x_{i,4}(t)] = L_3 x_{i,3} + V_5 y_{i,5} - L_4 x_{i,4} - V_4 y_{i,4} \quad Ec.(56)$$

Plato 4

$$\frac{d}{dt} [M_5 x_{i,5}(t)] = L_4 x_{i,4} + V_6 y_{i,6} - L_5 x_{i,5} - V_5 y_{i,5} \quad Ec.(57)$$

Plato 5

$$\frac{d}{dt} [M_6 x_{i,6}(t)] = L_5 x_{i,5} + V_7 y_{i,7} - L_6 x_{i,6} - V_6 y_{i,6} \quad Ec.(58)$$

Rehervidor

$$\frac{d}{dt} [M_7 x_{i,7}(t)] = L_6 x_{i,6} - V_7 y_{i,7} \quad Ec.(59)$$

Con el conjunto de ecuaciones anteriores queda descrito el sistema y su solución genera los perfiles de concentración en la fase líquida para cada tiempo; mediante las relaciones de equilibrio y las ecuaciones de punto de burbuja, se obtienen los perfiles de concentración de etanol en la fase gaseosa y la variación de temperatura en cada etapa.

3.6 MODELADO TERMODINÁMICO

3.6.1 Equilibrio líquido – vapor

El sistema etanol-agua, es altamente no ideal, razón por la cual fue necesario modelar tanto el coeficiente de actividad para la fase líquida como el coeficiente de fugacidad para la fase vapor, la formulación Gamma/Phi del EVL propone la siguiente ecuación para la obtención de los datos de equilibrio [18]:

$$y_i \phi_i P = x_i \gamma_i P_i^{sat} \quad \text{Ec. (60)}$$

El coeficiente de actividad se calculó a partir del modelo termodinámico UNIFAC empleando las ecuaciones 48, 49 y 50.

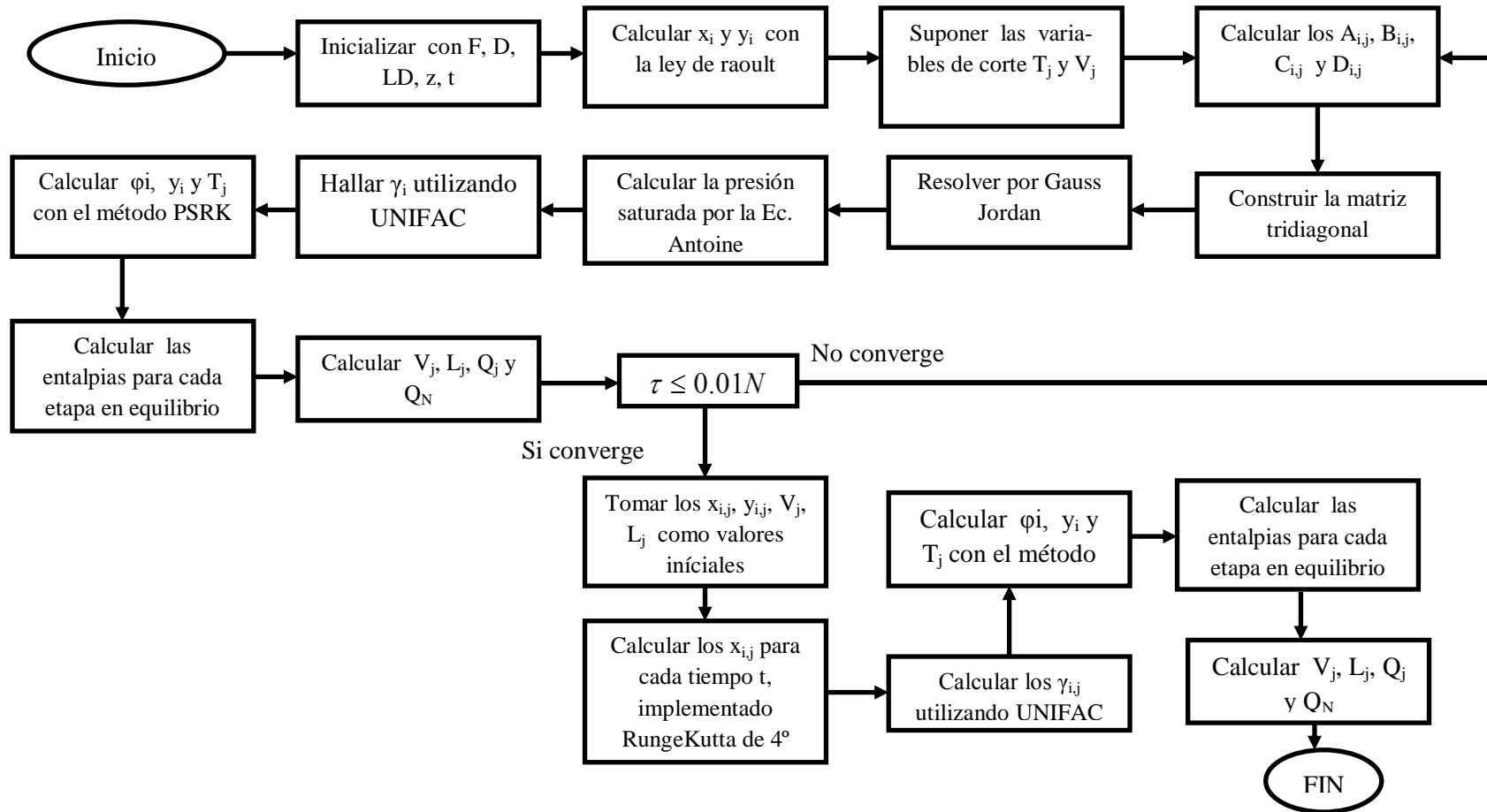
El coeficiente de fugacidad fue determinado por el método PSRK (Predictive Soave-Redlich-Kwong) utilizando la ecuación:

$$\ln \phi_i = \frac{B_i}{B_m} \left(Z_m - 1 - \ln(Z_m - B_m) - \alpha_i \cdot \ln \left(1 + \frac{B_m}{Z_m} \right) \right) \quad \text{Ec. (61)}$$

Para más detalle acerca de los modelos termodinámicos y sus parámetros véase Anexo D.

3.7 Método de Solución del Modelo Matemático

Figura 6. Algoritmo general para la solución del modelado matemático



Fuente: Elaborada en la presente investigación.

3.8. VALIDACIÓN

3.8.1 Validación del modelo Termodinámico

La validación de los modelos termodinámicos empleados, consistió en calcular las fracciones molares de etanol en fase gaseosa para cada composición experimental de etanol en fase líquida tomadas del manual del ingeniero químico, con el fin de determinar la desviación de los modelos con respecto a los datos experimentales, se utilizó la *Ec.(60)* donde los coeficientes de actividad y fugacidad fueron determinados a partir de los modelos UNIFAC y PSRK respectivamente y la presión de saturación se calculó por la ecuación de Antoine, también se determinaron las temperaturas de equilibrio por medio de las ecuaciones de punto de burbuja y se compararon con las obtenidas experimentalmente.

3.8.2 Validación del modelo Matemático

Para establecer la confiabilidad de los modelos y poder implementar el algoritmo de simulación al módulo tutorial, fue necesario contrastar los perfiles de concentración de etanol arrojados por el modelo y los obtenidos mediante pruebas experimentales llevadas a cabo en la torre de destilación a escala piloto, se realizaron ocho corridas a las composiciones de 0.15, 0.25, 0.35 y 0.40, operando a reflujo total y sin reflujo; con el propósito de verificar el carácter predictivo de los algoritmos de Thomas y Wang-Henke una vez alcanzado el estado estable se tomaron muestras en los platos 1, 3 y 5, luego se operó la torre a la condición de sin reflujo para determinar la veracidad del método Runge-Kutta, en este caso se tomó una muestra más para el destilado.

3.9. CONSTRUCCIÓN DEL MÓDULO TUTORIAL

El modulo tutorial llamado “AJM-SimDest 1.0” fue construido en la interfaz gráfica de MATLAB; para garantizar la interactividad entre usuario y software el ambiente computacional posee los siguientes elementos:

- Cuadros de texto editables: en esta opción el usuario puede introducir las condiciones de operación que desea simular.
- Botones: dan la orden al programa para que se ejecute.
- Menú: desde donde se puede acceder a las distintas plataformas del programa.
- Tablas: muestran los datos calculados.
- Gráficos: permiten visualizar el comportamiento del sistema a las condiciones de operación introducidas.
- Barras desplegables: ejecuta la acción que el usuario elija dentro de un rango.
- Panel de opciones: por medio de esta opción el usuario puede decidir que variables desea graficar.

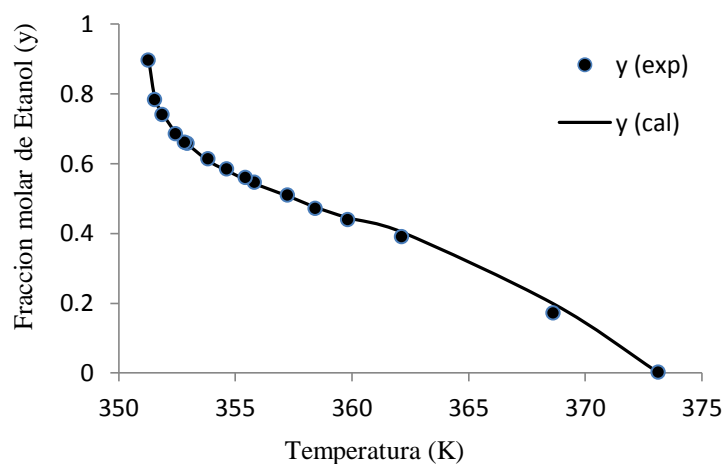
4. RESULTADOS

4.1 VALIDACIÓN DEL MODELADO TERMODINÁMICO

Al comparar los datos de equilibrio experimentales para la mezcla etanol- agua, con los calculados a partir de los modelos termodinámicos UNIFAC y PSRK, se obtuvo un error promedio de 1.9% para la composición de etanol en fase gaseosa, donde las mayores desviaciones se alcanzan a bajas composiciones de etanol en fase líquida, con un error máximo de 16.64%. Las temperaturas de equilibrio determinadas tienen un error promedio de 0.12%, reportando un error máximo de 0.45% y mínimo de 0.021% en el rango de datos, (véase la Tabla F1).

La Figura 7 muestra el comportamiento de las composiciones de etanol en fase gaseosa respecto a la temperatura, los puntos corresponden a datos experimentales, mientras que la línea continua representa la simulación de los modelos termodinámicos. Como se puede apreciar, los modelos empleados se ajustan correctamente a los datos. Sin embargo para la fracción molar experimental de 0.17, se presenta una leve desviación, la cual no es significativa. Esto también puede apreciarse en la tabla F1.

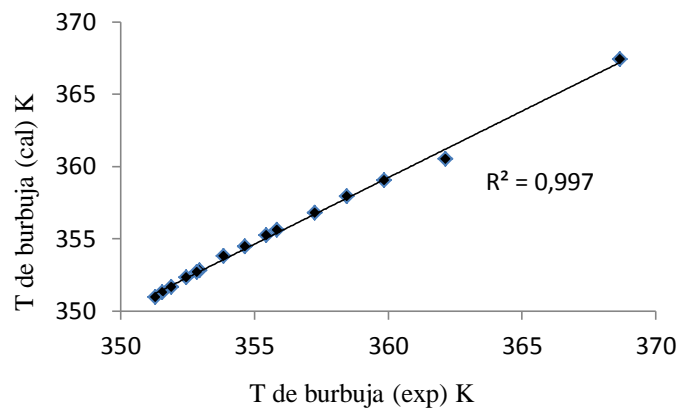
Figura 7. Perfil de concentración de etanol en fase gaseosa



Fuente: Elaborado en la presente investigación.

La Figura 8, es una gráfica de dispersión, relaciona las temperaturas de equilibrio experimentales (eje abscisa) y calculadas (eje ordenada), e indica que las variables están fuertemente correlacionadas, por consiguiente el modelo termodinámico predice correctamente las temperaturas de equilibrio, lo cual se soporta al obtener un coeficiente de determinación de 0.997.

Figura 8. Grafica de dispersión de la temperatura de burbuja



Fuente: Elaborado en la presente investigación.

4.2 VALIDACIÓN DEL MODELADO MATEMATICO

La validación del modelo matemático se dividió en dos condiciones de operación, a reflujo total y sin reflujo, en las cuales se trabajaron con fracciones molares de alimento de 0.15, 0.25, 0.35 y 0.40. En las Tablas 4 y 5, se comparan los datos simulados, con los experimentales para las composiciones de 0.15 y 0.40, el mayor error reportado operando a reflujo total fue de 0.74% en el plato 5, y 1.28% en el plato 3, para cada fracción de alimento respectivamente (enumerando los platos de la columna de arriba hacia abajo), mientras que los errores mínimos fueron de 0.062%, en el plato 1 y 0.033% en el plato 5.

Tabla 4. Datos reales y simulados en los platos 1, 3 y 5 para una composición de alimentación de 0.15 molar, operando a reflujo total.

t (min)	Simulación			Experimental			% Error		
	Etapa			Etapa			Etapa		
	1	3	5	1	3	5	1	3	5
0	0,8109	0,7354	0,4993	0,8114	0,736	0,501	0,0617	0,0816	0,3405
10	0,8109	0,7354	0,4993	0,81	0,7362	0,502	0,1110	0,1088	0,5408
20	0,8109	0,7354	0,4993	0,8097	0,734	0,4956	0,1480	0,1904	0,7410

Fuente: Elaborada en la presente investigación

Tabla 5. Datos reales y simulados en los platos 1, 3 y 5 para una composición de alimentación de 0.4 molar, operando a reflujo total.

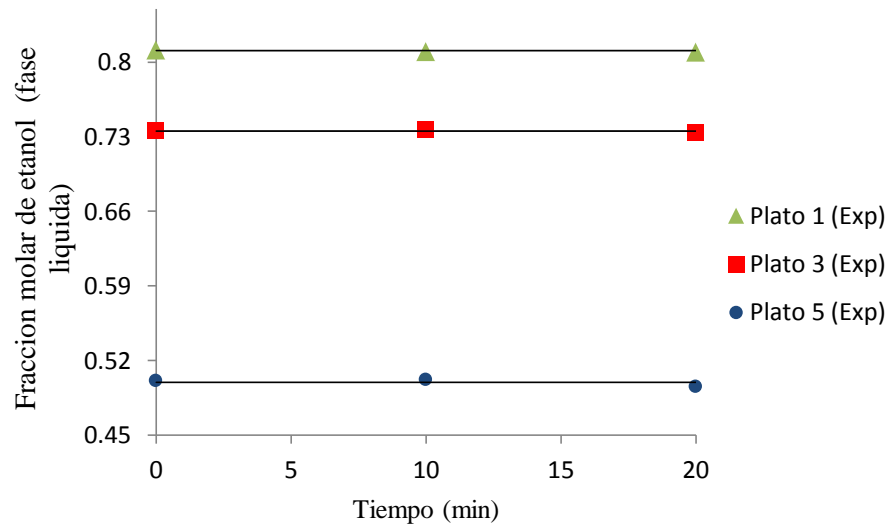
t (min)	Simulación			Experimental			% Error		
	Etapa			Etapa			Etapa		
	1	3	5	1	3	5	1	3	5
0	0,8269	0,7678	0,6126	0,824	0,7645	0,6124	0,3507	0,4298	0,0326
10	0,8269	0,7678	0,6126	0,8195	0,758	0,61	0,8949	1,2764	0,4244
20	0,8269	0,7678	0,6126	0,8236	0,7625	0,615	0,3991	0,6903	0,3918

Fuente: Elaborada en la presente investigación.

Las tablas que reportan los datos de las corridas a una fracción molar de alimento de 0.25 y 0.35 pueden verse en los Anexos E.

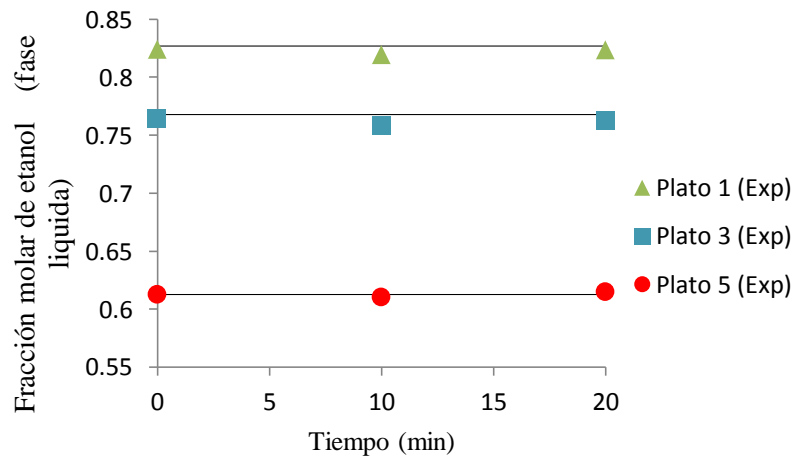
Las Figuras 9 y 10, muestran el comportamiento de los platos 1, 3 y 5 operando a reflujo total con respecto al tiempo, esto se consigue retornando como liquido saturado todo el vapor que abandona el plato 1, los puntos simbolizan datos experimentales, mientras que las líneas continuas representan la simulación a las mismas condiciones, se puede apreciar que las curvas obtenidas tienen una tendencia lineal en función del tiempo, lo cual es característico de procesos en estado estable, por consiguiente queda demostrada la consideración general del modelado matemático.

Figura 9. Comportamiento real y simulado en los platos 1, 3 y 5 para una composición de alimentación de 0.15 molar, operando a reflujo total.



Fuente: Elaborado en la presente investigación

Figura 10. Comportamiento real y simulado en los platos 1, 3 y 5 para una composición de alimentación de 0.4 molar, operando a reflujo total.



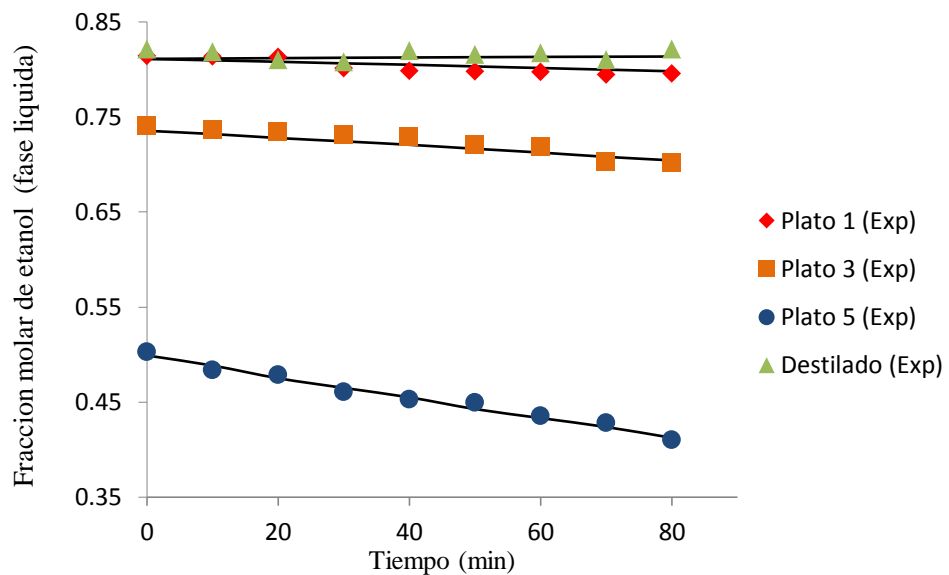
Fuente: Elaborado en la presente investigación

Al aumentar la fracción molar de alimentación de 0.15 a 0.40 ocurre un desplazamiento de 0.016, 0.032 y 0.11 para los platos 1, 3 y 5 respectivamente, en los perfiles de concentración de la torre; a pesar de que hubo un aumento considerable en la

composición de alimentación, la variación de las concentraciones en los platos no son muy apreciables, esto debido a la no idealidad del sistema, la tendencia reflejada es a disminuir las diferencias a medida que aumentan las etapas, puesto que las concentraciones se van acercando al punto azeotrópico de la mezcla.

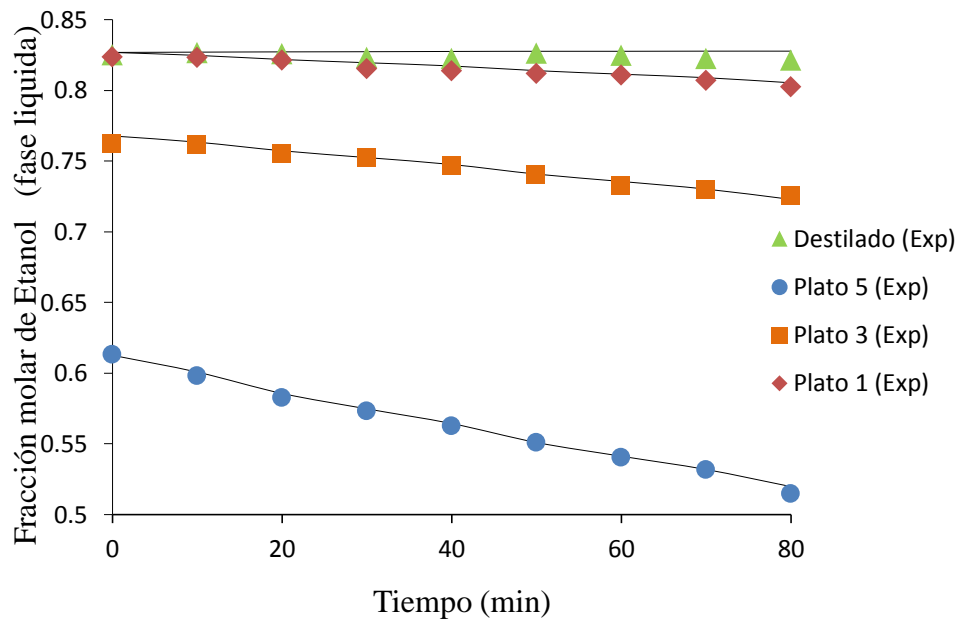
Las Figuras 11 y 12, describen el comportamiento dinámico de la torre, mostrando los perfiles de concentración del producto destilado y los platos 1, 3 y 5. Para las fracciones de alimentación de 0.15 y 0.40, las concentraciones en el tiempo cero “0”, corresponden a las fracciones molares de etanol operando a reflujo total.

Figura 11. Comportamiento real y simulado en los platos 1, 3, 5 y en el producto destilado, para una composición de alimentación de 0.15 molar, operando sin reflujo.



Fuente: Elaborada en la presente investigación

Figura 12. Comportamiento real y simulado en los platos 1, 3, 5 y en el producto destilado, para una composición de alimentación de 0.4 molar, operando sin reflujo.



Fuente: Elaborada en la presente investigación

En las gráficas se observa que al transcurrir el tiempo las composiciones disminuyen, esto debido a que el etanol se agota en todas las etapas conforme se extrae constantemente un flujo de destilado; las líneas que describe el comportamiento del plato 5, poseen la pendiente con mayor decrecimiento en comparación con las demás etapas para ambas composiciones de alimento, lo cual refleja que la separación se efectúa con más facilidad a concentraciones donde el diagrama de equilibrio se distancia en mayor proporción de la recta de 45° (véase ANEXO F).

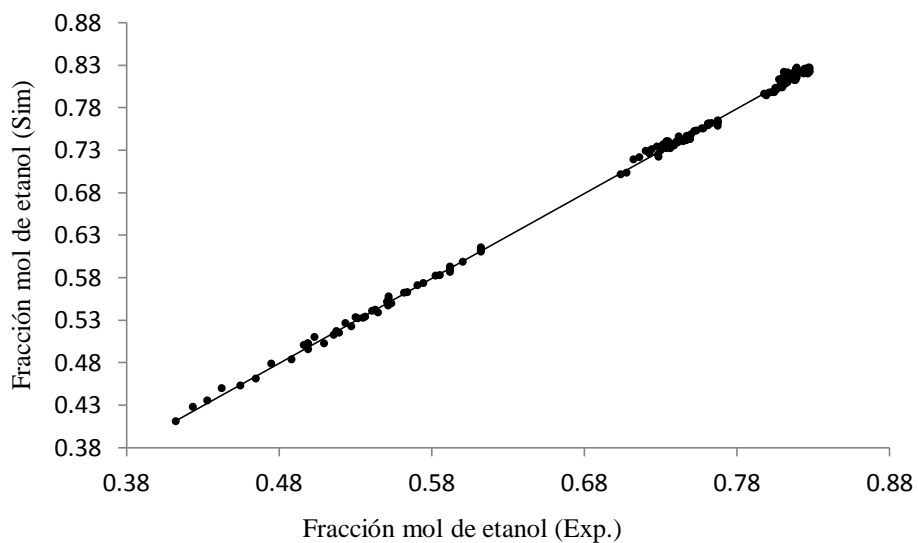
La torre de destilación a escala piloto posee un condensador total, es decir que todo el vapor ascendente del plato 1 se convierte en líquido saturado, por consiguiente la composición del destilado es igual a la fracción molar del vapor que abandona la etapa 1 ($y_1 = x_D$), esto explica la cercanía entre la curva del plato 1 y la del destilado, para los primeros 10 minutos de operación, estas se encuentran en su máxima proximidad. Puesto que recién inicia la operación de separación y aun no se retira una cantidad apreciable de etanol del sistema, sin embargo al transcurrir el tiempo puede verse que la curva que describe la concentración en el plato 1 decae, debido al agotamiento de etanol en el mismo, mientras que la del destilado permanece casi constante, dado a que

conforme avanza la destilación, se está removiendo etanol del sistema como vapor saturado por el tope de la columna, no obstante todo este vapor es condensado y almacenado como producto destilado.

Las tablas 4 y 5, contrastan los datos simulados con los experimentales para la condición sin reflujo a las anteriores composiciones de alimentación, los errores máximos fueron de 1.45% y 0.95% ambas en el plato 5. Por otra parte se alcanzaron errores mínimos de 0.22% en el destilado y 0.018% en el plato 5; las desviaciones son relativamente bajas, producto de emplear métodos rigurosos para la obtención de condiciones iniciales, lo cual garantiza un mínimo margen de error, la efectividad de la simulación y la capacidad de convergencia del software creado “AJM-SimDest 1.0”.

La Figura 13, es un grafica de dispersión, que relaciona todos los datos experimentales de la fracción mol de etanol con los simulados, los errores reportados oscilan entre 1.51% y 0.017%, con una desviación promedio de 0.48%, lo cual demuestra que el modelo matemático predice satisfactoriamente el comportamiento real de la torre.

Figura 13. Grafica de dispersión del modelado matemático



4.3 MODULO TUTORIAL

La Figura 14, es la presentación del software desarrollado, cuyo nombre es “AJM-SimDest 1.0”, la foto mostrada corresponde a la torre de destilación simulada, en la parte superior señalado con una flecha se encuentra el menú desde donde se puede acceder a las plataformas del módulo, contiene los siguientes apartados: Simulación, Teoría y métodos aplicados, Torre de Destilación e información.

Figura 14.Presentación del módulo tutorial



Fuente: Elaborada en la presente investigación.

Al seleccionar cualquier apartado del menú se despliegan un conjunto de opciones con aplicaciones, métodos o teorías dependiendo del apartado seleccionado, categorizando por niveles según sea el caso. En el caso particular de teoría y métodos aplicados, se observa en la Figura 15, que está conformado por un primer, segundo y tercer nivel, identificados respectivamente por los números 1, 2 y 3.

Figura 15. Descripción del menú

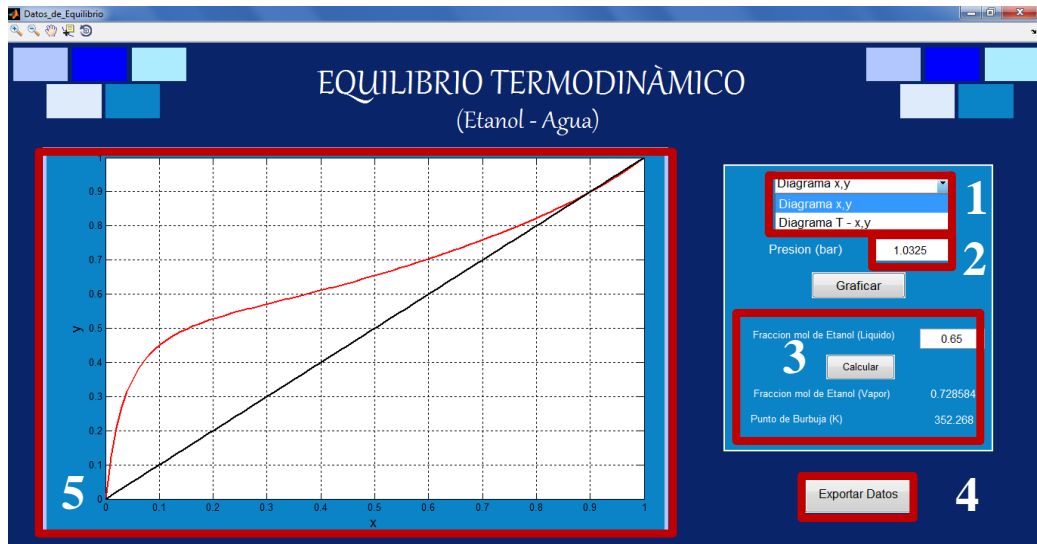


Fuente: Elaborada en la presente investigación.

La aplicación ilustrada en la Figura 16 se encuentra en la dirección Teoría y aplicaciones → Termodinámica de la mezcla → Equilibrio Termodinámico. Como su nombre lo indica esta herramienta, grafica en el recuadro 5, los diagrama de equilibrio xy y T-xy para la mezcla etanol-agua, dependiendo de la opción seleccionada por el usuario en el recuadro 1, a la presión ingresada en el cuadro de texto editable (numero 2).

En el recuadro 3 al ingresar una fracción molar de etanol en fase líquida, se obtiene su respectiva composición en equilibrio en fase gaseosa y su temperatura de burbuja; el botón 4 exporta la data generada a Excel en caso de que el usuario desea realizarle algún tratamiento a estos datos.

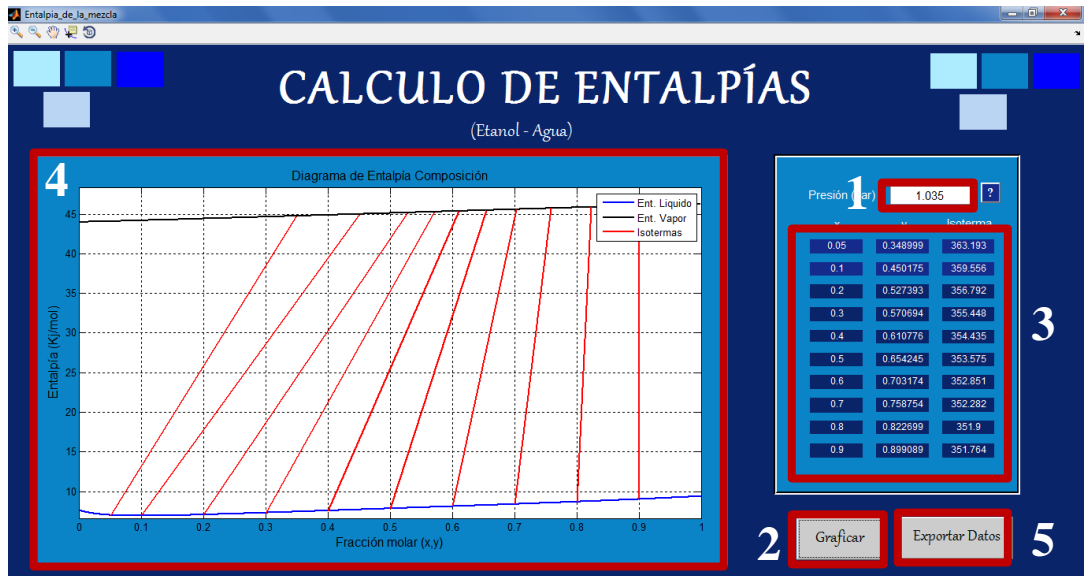
Figura 16.Equilibrio Termodinámico



Fuente: Elaborada en la presente investigación.

La Figura 17, muestra la aplicación para el cálculo de entalpías de la mezcla etanol agua, se encuentra en la dirección: Teoría y aplicaciones →Termodinámica de la mezcla →Calculo de Entalpías, el numero 1 representa un cuadro de texto editable, donde el usuario puede digitar el valor de la presión a la cual desea calcular las entalpías de la mezcla, el botón graficar identificado con el número 2, ejecuta el programa e inmediatamente se grafica el diagrama de entalpia con sus respectivas isothermas, las cuales se reportan en el cuadro numero 3 junto con las composiciones en la fase liquida y vapor. Al dar clic en el botón exportar datos (numero 5), se abre un documento de Excel, en el cual se muestran todos los datos calculados.

Figura 17. Interfaz gráfica para el cálculo de entalpías.

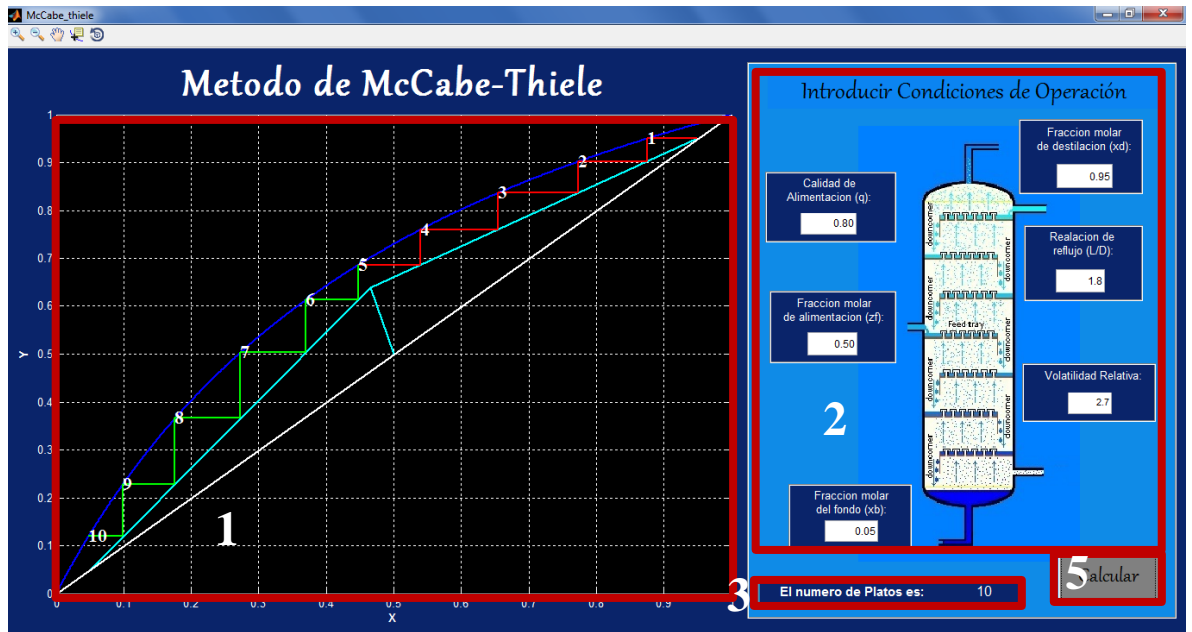


Fuente: Elaborada en la presente investigación.

El software “AJM-SimDest 1.0” cuenta con una sección para el desarrollo y aplicación del método grafico McCabe-Thiele, en la Figura 18. Se ilustra la interfaz gráfica del método anteriormente mencionado, el cual determina el número de etapas teóricas de un proceso de destilación a las condiciones de operación digitadas por el usuario en el recuadro 2, estas son: fracciones de tope, cola y alimento, volatilidad relativa y calidad de alimentación.

En el recuadro 1 se grafican las líneas de operación, para la sección de enriquecimiento y agotamiento, la línea donde se ubica el plato de alimentación, la curva de equilibrio y la recta $x=y$, además se trazan las etapas necesarias para llevar a cabo la operación de separación. En el recuadro 3 se presentan las etapas teóricas resultantes.

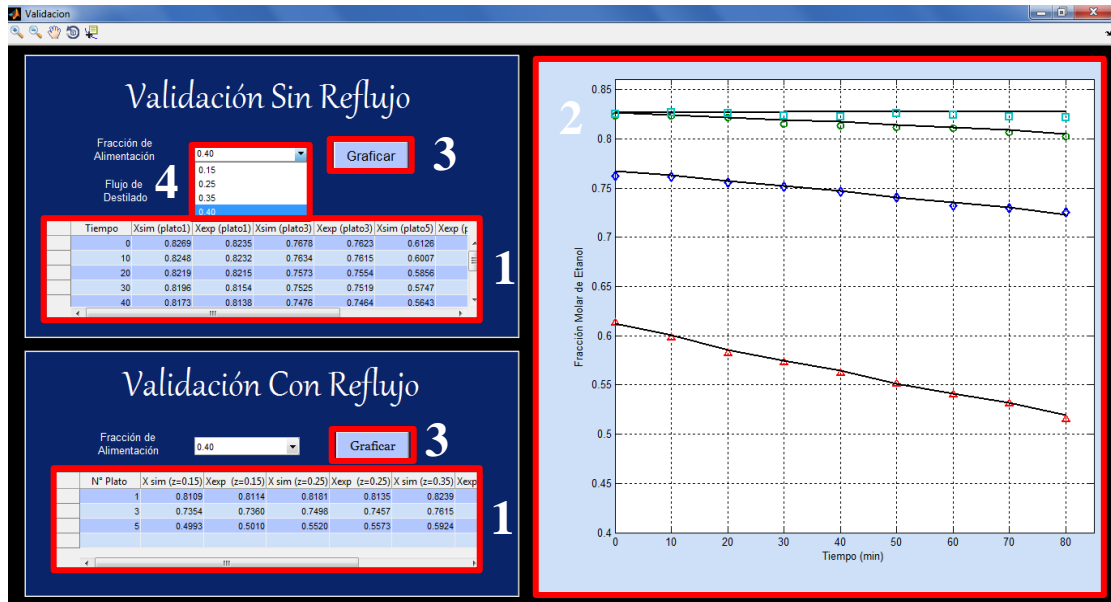
Figura 18. Interfaz gráfica para la aplicación el Método McCabe-Thiele



Fuente: Elaborada en la presente investigación.

La Figura 19, representa la validación del modelo matemático, a condiciones de con y sin reflujo, en las tablas marcadas con el número 1, se muestran los datos experimentales y simulados para las composiciones de alimentación que pueden seleccionarse de la barra desplegable 4, los botones etiquetados con el numero 3 grafican los datos para cada corrida los cuales se visualizan en el recuadro 2.

Figura 19. Interfaz gráfica de la validación del modelado matemático.



Fuente: Elaborada en la presente investigación.

En la Figura 20. Se ilustra la plataforma creada para simular la torre de destilación a escala piloto operando a reflujo total, se encuentra dividido en cuatro secciones:

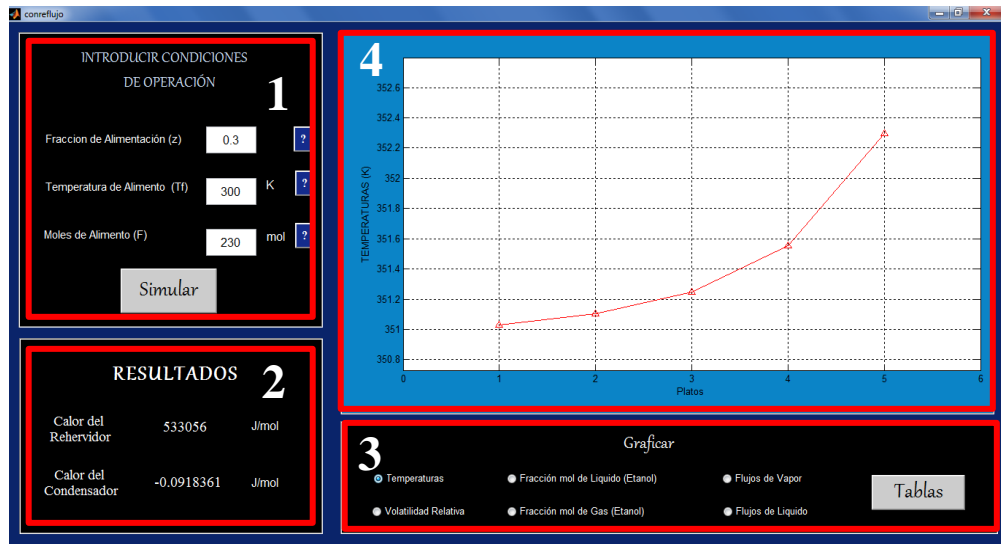
Sección 1: posee cuadros de texto editables, en los cuales se debe introducir la fracción, temperatura y moles de alimentación, el botón simular ejecuta el programa.

Sección 2: se muestran los resultados para los calores del rehervidor y condensador a las condiciones ingresadas.

Sección 3: el usuario puede elegir las variables que desea graficar, el botón tablas genera los datos calculados a partir de los cuales se realizan las gráficas.

Sección 4: presenta el comportamiento etapa a etapa de la variable seleccionada en la sección 3.

Figura 20. Simulador de la torre de destilación operando a reflujo total.



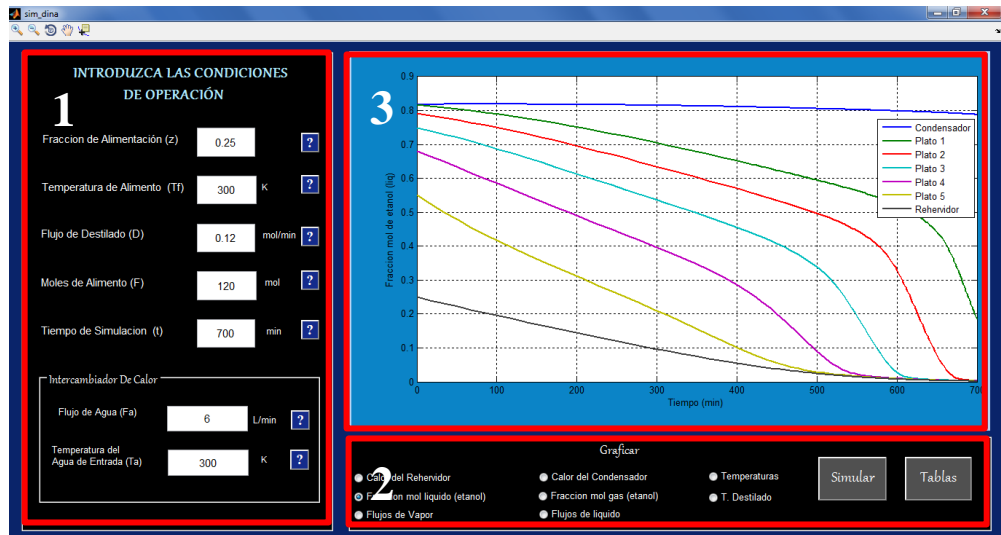
Fuente: Elaborada en la presente investigación.

En la Figura 21, se ilustra la plataforma creada para simular la torre de destilación a escala piloto operando sin reflujo, la cual se encuentra en el apartado simulación → simulación de la torre → sin reflujo, a continuación se presenta una breve explicación del modo de uso de la interfaz.

Para simular la torre de destilación, se necesitan unas condiciones de operación que deben ser introducidas en la sección 1, estas son:

- Fracción de alimentación
- Temperatura de alimento
- Flujo de destilado
- Moldes de alimento
- Tiempo de simulación
- Flujo de agua al condensador
- Temperatura del agua refrigerante

Figura 21. Simulador de la torre de destilación operando sin reflujo.



Fuente: Elaborada en la presente investigación.

Una vez introducidas las condiciones de operación, se debe dar clic al botón simular ubicado en la sección 2 y elegir una opción a graficar; al oprimir el botón tablas se abrirá la siguiente ventana:

Figura 22. Interfaz gráfica para el reporte de datos simulados.

Tiempo (min)	x condensador	x plato 1	x plato 2	x plato 3	x plato 4	x plato 5	x rehervidor	y plato 1	y plato 2	y plato 3	y plato 4	y plato 5	y rehervidor	T plato 1 (K)	T plato 2 (K)	T plato 3 (K)	T plato 4 (K)
0	0.8181	0.8181	0.7913	0.7495	0.6808	0.5517	0.2497	0.8356	0.8189	0.7894	0.7477	0.6790	0.5504	351.3188	351.3188	351.5295	351.840
17.0598	0.8183	0.8140	0.7852	0.7402	0.6655	0.5250	0.2403	0.8326	0.8127	0.7835	0.7389	0.6661	0.5463	351.3266	351.3266	351.5662	351.921
34.1196	0.8184	0.8095	0.7787	0.7303	0.6495	0.5002	0.2310	0.8295	0.8084	0.7773	0.7300	0.6545	0.5423	351.3374	351.3374	351.6073	352.010
51.1793	0.8185	0.8049	0.7718	0.7198	0.6331	0.4799	0.2218	0.8262	0.8038	0.7709	0.7210	0.6439	0.5381	351.3495	351.3495	351.6528	352.106
68.2391	0.8185	0.7999	0.7645	0.7098	0.6164	0.4549	0.2126	0.8226	0.7990	0.7642	0.7120	0.6342	0.5338	351.3628	351.3628	351.7028	352.208
85.2989	0.8185	0.7945	0.7566	0.6971	0.5993	0.4336	0.2033	0.8191	0.7939	0.7572	0.7030	0.6250	0.5293	351.3780	351.3780	351.7598	352.317
102.3587	0.8186	0.7887	0.7482	0.6849	0.5821	0.4132	0.1941	0.8152	0.7886	0.7501	0.6942	0.6164	0.5246	351.3947	351.3947	351.8195	352.431
120.3991	0.8185	0.7827	0.7395	0.6724	0.5651	0.3936	0.1849	0.8111	0.7831	0.7429	0.6856	0.6083	0.5197	351.4133	351.4133	351.8845	352.548
138.4395	0.8184	0.7764	0.7305	0.6596	0.5482	0.3747	0.1758	0.8068	0.7774	0.7356	0.6772	0.6006	0.5145	351.4336	351.4336	351.9537	352.669
156.4799	0.8183	0.7697	0.7211	0.6467	0.5315	0.3563	0.1668	0.8024	0.7716	0.7284	0.6692	0.5932	0.5091	351.4560	351.4560	352.0269	352.792
174.5203	0.8181	0.7627	0.7114	0.6335	0.5149	0.3384	0.1579	0.7979	0.7657	0.7212	0.6613	0.5861	0.5034	351.4803	351.4803	352.1038	352.918
192.5607	0.8179	0.7555	0.7014	0.6203	0.4985	0.3207	0.1491	0.7932	0.7598	0.7141	0.6537	0.5791	0.4973	351.5068	351.5068	352.1842	353.047
210.6011	0.8176	0.7480	0.6912	0.6070	0.4822	0.3031	0.1404	0.7884	0.7537	0.7070	0.6463	0.5721	0.4907	351.5355	351.5355	352.2679	353.178
228.6415	0.8173	0.7402	0.6808	0.5936	0.4661	0.2857	0.1318	0.7835	0.7477	0.7000	0.6391	0.5651	0.4837	351.5663	351.5663	352.3547	353.311
246.6819	0.8169	0.7322	0.6702	0.5802	0.4499	0.2681	0.1233	0.7785	0.7416	0.6932	0.6321	0.5580	0.4761	351.5995	351.5995	352.4445	353.448
264.7223	0.8164	0.7239	0.6594	0.5667	0.4338	0.2505	0.1150	0.7734	0.7355	0.6864	0.6251	0.5507	0.4678	351.6348	351.6348	352.5371	353.588
282.7627	0.8160	0.7154	0.6485	0.5533	0.4175	0.2326	0.1068	0.7682	0.7294	0.6797	0.6182	0.5429	0.4588	351.6725	351.6725	352.6327	353.733
300.8031	0.8154	0.7068	0.6375	0.5397	0.4010	0.2144	0.0988	0.7630	0.7234	0.6731	0.6113	0.5346	0.4489	351.7124	351.7124	352.7312	353.884
318.8435	0.8149	0.6979	0.6264	0.5262	0.3841	0.1958	0.0909	0.7577	0.7173	0.6666	0.6044	0.5255	0.4380	351.7546	351.7546	352.8327	354.042
336.8839	0.8142	0.6890	0.6152	0.5125	0.3666	0.1769	0.0833	0.7524	0.7113	0.6602	0.5973	0.5152	0.4260	351.7990	351.7990	352.9376	354.210
354.9243	0.8136	0.6798	0.6039	0.4988	0.3483	0.1577	0.0758	0.7471	0.7054	0.6538	0.5900	0.5033	0.4129	351.8456	351.8456	353.0463	354.392
372.9647	0.8128	0.6705	0.5925	0.4845	0.3287	0.1383	0.0686	0.7418	0.6995	0.6474	0.5823	0.4891	0.3983	351.8944	351.8944	353.1595	354.579
391.0051	0.8121	0.6611	0.5810	0.4701	0.3076	0.1190	0.0617	0.7365	0.6936	0.6409	0.5739	0.4719	0.3823	351.9455	351.9455	353.2781	354.819
409.0455	0.8113	0.6516	0.5693	0.4551	0.2842	0.1002	0.0551	0.7311	0.6877	0.6343	0.5645	0.4507	0.3646	351.9987	351.9987	353.4038	355.083
427.0859	0.8104	0.6420	0.5575	0.4395	0.2578	0.0825	0.0488	0.7258	0.6818	0.6275	0.5538	0.4248	0.3453	352.0541	352.0541	353.5388	355.403
445.1263	0.8101	0.6386	0.5533	0.4338	0.2479	0.0768	0.0466	0.7239	0.6798	0.6251	0.5496	0.4146	0.3382	352.0738	352.0738	353.5883	355.632
463.1667	0.8098	0.6352	0.5492	0.4280	0.2374	0.0713	0.0446	0.7221	0.6777	0.6226	0.5451	0.4038	0.3309	352.0938	352.0938	353.6396	355.873
481.2071	0.8094	0.6318	0.5449	0.4220	0.2265	0.0661	0.0425	0.7202	0.6757	0.6201	0.5402	0.3926	0.3234	352.1141	352.1141	353.6928	356.117
500.2475	0.8091	0.6284	0.5407	0.4159	0.2151	0.0611	0.0406	0.7184	0.6736	0.6175	0.5350	0.3808	0.3157	352.1347	352.1347	353.7482	356.369
519.2879	0.8088	0.6250	0.5364	0.4095	0.2032	0.0565	0.0386	0.7166	0.6715	0.6149	0.5292	0.3687	0.3078	352.1556	352.1556	353.8061	356.628
538.3283	0.8084	0.6215	0.5321	0.4029	0.1908	0.0522	0.0368	0.7147	0.6695	0.6121	0.5229	0.3563	0.2998	352.1767	352.1767	353.8669	356.892
557.3687	0.8081	0.6180	0.5277	0.3959	0.1780	0.0483	0.0349	0.7128	0.6674	0.6093	0.5158	0.3437	0.2915	352.1982	352.1982	353.9310	357.160
576.4091	0.8078	0.6146	0.5232	0.3887	0.1648	0.0446	0.0331	0.7110	0.6652	0.6063	0.5079	0.3311	0.2831	352.2200	352.2200	353.9992	357.432
595.4495	0.8074	0.6114	0.5192	0.3818	0.1528	0.0416	0.0316	0.7093	0.6633	0.6035	0.4999	0.3199	0.2755	352.2397	352.2397	354.0640	357.707
614.4899	0.8071	0.6083	0.5151	0.3746	0.1405	0.0388	0.0301	0.7077	0.6614	0.6006	0.4909	0.3087	0.2677	352.2597	352.2597	354.1333	357.982
633.5303	0.8068	0.6051	0.5109	0.3669	0.1282	0.0363	0.0286	0.7060	0.6595	0.5975	0.4806	0.2977	0.2598	352.2799	352.2799	354.2078	358.257
652.5707	0.8065	0.6019	0.5066	0.3587	0.1159	0.0339	0.0272	0.7043	0.6575	0.5942	0.4687	0.2869	0.2519	352.3004	352.3004	354.2885	358.532

Fuente: Elaborada en la presente investigación.

En la cual se reportan numéricamente los datos simulados para cada una de las variables con respecto al tiempo. Las gráficas que muestran el comportamiento de la torre para las variables seleccionadas en la sección 2, se presentan en la sección 3.

Además de las plataformas anteriormente descritas, el software desarrollado también contiene información acerca del concepto, clasificación y tipos de destilación como extractiva, reactiva, flash, fraccionada entre otras, por otra parte incluye el manual y el correcto funcionamiento de la torre de destilación a escala piloto simulada, así como los aspectos técnicos de esta, por ultimo cuenta con dos presentaciones en las cuales se ilustran los métodos gráficos McCabe-Thiele y Ponchon-Savarit, utilizados ampliamente para el diseño de torres de destilación.

5. CONCLUSIONES

Los modelos termodinámicos utilizados (UNIFAC y PSRK) reportaron errores promedios de 1.9% para el cálculo de la fracción molar de etanol en la fase gaseosa y 0.1235% para la temperatura de equilibrio, por lo que se concluye que estos describen correctamente el equilibrio de la mezcla etanol – agua.

La evaluación del modelo matemático descrito se realizó en una columna de destilación a escala piloto usando una mezcla binaria altamente no ideal (etanol - agua). La verificación de la proximidad del modelo con el proceso real se realizó mediante la comparación de las composiciones de etanol en algunos platos de la columna (1, 3 y 5). Los resultados de esta evaluación permiten concluir que en todas las etapas la respuesta cualitativa y cuantitativa fue correcta, puesto que las desviaciones de los datos contrastados oscilan entre 1.51% y 0.017%, con un error promedio de 0.48%, lo cual demuestra que el modelo matemático predice satisfactoriamente el comportamiento real de la torre.

El modulo tutorial desarrollado llamado “AJM-SimDest1.0”, contiene distintas plataformas que facilitan la comprensión y análisis del proceso de destilación, funciona como un simulador para la torre de destilación a escala piloto ubicada en el laboratorio de operaciones unitarias del programa de Ingeniería Química en la Universidad de Cartagena. Este software también permite la estimación de propiedades termodinámicas (presiones de saturación, entalpías, calores latentes de vaporización) y el cálculo de relaciones de equilibrio para la mezcla etanol-agua, y puede ser utilizado en el diseño de torres de destilación binarias aplicando el método de McCabeThiele.

Las plataformas de simulación y de cálculo de propiedades termodinámicas del software solo pueden ser utilizadas para la mezcla etanol-agua, debido a que es la más utilizada al momento de realizar las prácticas de laboratorio en el programa.

La experimentación se llevó a cabo por un periodo de 80 minutos por lo cual no pudo apreciarse el agotamiento de etanol en las etapas de la columna, sin embargo el software de simulación, para corriente de destilado y tiempo de simulación altos refleja este comportamiento.

6. RECOMENDACIONES

- Alcanzar el estado estable de la torre de destilación operando a reflujo total antes de empezar a obtener producto destilado, evita las desviaciones entre el sistema real y simulado.
- Operar la torre de destilación a un tiempo mayor a dos horas, con el fin de comprobar el agotamiento de etanol que se presenta en la simulación.
- Utilizar un equipo para medir la concentración de etanol en fase líquida que requiera poco volumen de muestra, evita el fenómeno de plato seco, lo cual ocasiona que se rompa el equilibrio.
- Operar la torre de destilación a escala piloto, en un nivel de resistencia térmica de 4 o 5 garantiza el correcto funcionamiento de la misma.
- Ampliar la base de datos del módulo tutorial, para la simulación de la torre con diferentes tipos de mezcla.

REFERENCIAS

- [1] G. Domínguez Hernández, I. Sánchez Bazán, A. Osorio Mirón, G. E. González Landero, L. A. Sánchez Bazán, E. Hernández Aguilar, *Interfaz Gráfica Computacional para Destilación Multicomponente utilizando Métodos Cortos*, NEXO Revista científica 24, No. 02 (2011) 123-129.
- [2] M. Buchholz, Bungartz, Vrabec, *Software design for a highly parallel molecular dynamics simulation framework in Chemical Engineering*, Journal of Computational Science 2 (2011) 124-129.
- [3] Rodríguez, Mena y Rubio, *Uso de software de simulación en la enseñanza de la Física. Una aplicación en la carrera de Ingeniería Química*, Redalyc 24, No. 2 (2009) 127-136.
- [4] Machuca M, Urresta O. *Software Para La Enseñanza De La Dinámica y Control De Intercambiadores De Calor De Tubo y Coraza*. Revista Facultad de Ingeniería 44(2008) 52-60.
- [5] Mesa y Lallemand-Najar, *Desarrollo de un módulo tutorial de una torre de destilación basado en el modelo matemático de soresl*, Trabajo de Grado en Ingeniería Química, Universidad de América, Bogotá DC, Colombia (2009).
- [6] Niño, Z y Pérez, S. *Simulación de procesos químicos en estado estacionario y no estacionario*, Redalyc (1991).
- [7] Camacho C, Niño Z, Pérez S. *Desarrollo de un módulo de cálculo para la simulación dinámica de un reactor químico por cargas compatible con el programa SimdinUC*, Redalyc 9, No 001 (2002).
- [8] H.B Dharmappa R.M Corderoy P Hagare, *Developing an interactive multimedia software package to enhance understanding of and learning outcomes in water treatment processes*. Elsevier 8 (2000) 407 – 411.

- [9] Pinto M. A, Coselli E, Silva F. J, Wolf R. M, Maciel R. *Development of a software for simulation analysis of the phenomenon of phase change of three-phase catalytic slurry reactor*, Computers and Chemical Engineering 29 (2005) 1369–1378.
- [10] Ortíz J, Rennola, Bullón J. *Módulo educativo multimedia para la enseñanza de dinámica y control de procesos*. Acción pedagógica, No 14, (2005) 96-103.
- [11] González A. *Observador Continuo-Discreto para la Estimación de Concentraciones en una Columna de Destilación, para la Mezcla Etanol-Agua*, Trabajo de maestría en ingeniería electrónica, Cuernavaca, México. Centro Nacional de Investigación y Desarrollo Tecnológico (2008).
- [12] Robert E. Treybal. *Operaciones de Transferencia de Masa*. Segunda edición, McGraw Hill, Mexico DF (1988).
- [13] Warren L. McCabe, Julian C. Smith, Peter Harriot. *Operaciones Unitarias en Ingeniería Química*. Cuarta edición, McGraw Hill, España - Madrid (1991).
- [14] Francisco de M. *Tipos De Destilación*. Universidad Nacional Experimental, (2009) 3-6
- [15] Universidad Autónoma de Madrid, *rectificación discontinua*, aérea de Ingeniería Química, (2006) 2-6.
- [16] Henley E. J, Seader D. J. *Operaciones De Separación Por Etapas De Equilibrio En Ingeniería Química*. Edi. Reverte S.A.
- [17] Víctor M. Alfaro, *Métodos numéricos para la solución de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO)*, Trabajo de maestría en ingeniería electrónica, Universidad de Costa Rica, Costa Rica (2005).
- [18] S. Godoy, N. Rodríguez, N.Scenna. *Propiedades Termodinámicas de Equilibrio, Determinación de estado de equilibrio de fases*. Facultad Regional Rosario, No 4,(2008) 22-24.

- [19] J. M. Smith, H. C. Vann Ness, m. m. Abbott. *Introducción a la termodinámica en Ingeniería Química*. Séptima edición, McGraw Hill, Mexico DF (2007).
- [20] Carrero, *simulación molecular del equilibrio químico para las reacciones de hidrogenación de benceno a ciclohexano, de hidrodeshalquilación de tolueno a benceno y de hidrogenación de etileno a etano y de propileno a propano*, tesis doctoral, Universidad del Valle, Cali Colombia (2005).
- [21] Fischer, Horstmann, Gardeler, *Predictive Soave Redlich Kwong Equation of State (PSRK)*, Industrial Chemistry – Gmehling, (2004).
- [22] PS – DA – 005 / PE. *Destilación En Columna De Platos A Pequeña Escala*. Manual pedagógico, técnico y de uso del equipo. Generatoris S.A de CV (2008).
- [23] Labomed, Inc. *Ficha técnica del espectrofotómetro modelo UV-2650, 2921S*. LaCienegaBlvd, Culver City, CA 90232 U.S.A.
- [24] Li-Sheng Wang, *Calculation of vapor–liquid equilibria of polymer solutions and gas solubilities in molten polymers based on PSRK equation of state*, Elsevier 260 (2007) 105-112.
- [25] Kleiman, Barragan, Bazua, *Estudio comparativo de la predicción de propiedades termodinámicas de sustancias polares con modelos recientes de ecuaciones de estado cubicas*, Redalyc 1, No 003, (2002) 119-135.
- [26] Robert H. Perry, *Manual del Ingeniero Químico*, sexta edición, Tomo IV, McGraw Hill, Mexico DF (1994).

ANEXOS

ANEXO A

Calculo de entalpias

Para la estimación del contenido energético de los flujos de líquido y vapor dentro de la columna en función de su composición se siguió el método propuesto por Smith y Van nes [19].

Para el cálculo de la entalpia de la mezcla liquida se empleó la siguiente expresión:

$$\Delta H_{i,l} = R \left[\int_{T_o}^{T_{ref}} C_{p_{l298}}^{ig} dT + \int_{T_{ref}}^T C_{p_l} dT \right] \quad Ec.(A.1)$$

La capacidad calorífica para la fase liquida está dada por la correlación:

$$C_{p_l} = A + BT + CT^{-2} \quad Ec.(A.2)$$

Los parámetros para el cálculo de la capacidad calorífica son:

Tabla A1. Constantes para el cálculo de la capacidad calorífica de la fase liquida.

Sustancia	A	10^3B	10^6C
Etanol (1)	33.866	-172.6	349.17
Agua (2)	8.712	1.25	-0.18

Fuente: introducción a la termodinámica en ingeniería química [19].

De manera análoga para el cálculo de la entalpia de la fase vapor, se utilizó la siguiente ecuación:

$$\Delta H_{v,l} = R \left[\int_{T_o}^{T_{ref}} C_{p_{v298}}^{ig} dT + \int_{T_{ref}}^T C_{p_v} dT \right] + \lambda \quad Ec.(A.3)$$

La capacidad calorífica para la fase vapor está dada por la expresión:

$$C_{p_v} = A + BT + CT^2 + DT^{-2} \quad Ec.(A.5)$$

Los parámetros para el cálculo de la capacidad calorífica son:

Tabla A2. Constantes para el cálculo de la capacidad calorífica de la fase vapor [19].

Sustancia	A	10^3B	10^6C	$10^{-5}D$
Etanol (1)	3.518	20.001	-6.002	0
Agua (2)	3.47	1.45	0	0.121

Fuente: Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química [18].

El cálculo de la entalpia de vaporización (λ) se realizó empleando la ecuación propuesta por Riedel:

$$\lambda = RTn \left(\frac{1.092(\ln P_c - 1.013)}{0.93 - Tr_n} \right) \quad Ec.(A.6)$$

Posteriormente, aplicando la corrección de este valor (λ) a cada temperatura de burbuja en cada etapa de la columna, por medio de la relación de Watson:

$$\frac{\lambda_1}{\lambda_2} = \left(\frac{1 - Tr_2}{1 - Tr_1} \right)^{0.38} \quad Ec.(A.7)$$

Con las ecuaciones anteriores calculamos la entalpia para una especie pura, por lo que se requirió aplicar una regla de mezclado para determinar el contenido energético de la mezcla, la cual fue para la fase líquida y gaseosa respectivamente:

$$\Delta H_L = \sum_{i=1}^2 x_i \Delta H_{i,l} \quad Ec.(A.8)$$

$$\Delta H_v = \sum_{i=1}^2 y_i \Delta H_{i,v} \quad Ec.(A.9)$$

ANEXO B

Calculo de presiones de vapor y temperaturas de saturación

La determinación de las presiones de vapor de los componentes (etanol – agua) se realizó empleando la ecuación de Antoine, donde la presión esta en Bar y la temperatura en K [20]:

$$\ln(P_i^{sat}) = A_i - \frac{B_i}{C_i + T} \quad Ec.(B.1)$$

Tabla B.1. Constantes de la ecuación de Antoine

Constante	Etanol	Agua
A_i	11.064	11.793
B_i	3121.9	3887.1
C_i	-68.978	-43.172

Fuente: Manual del Ingeniero Químico [27].

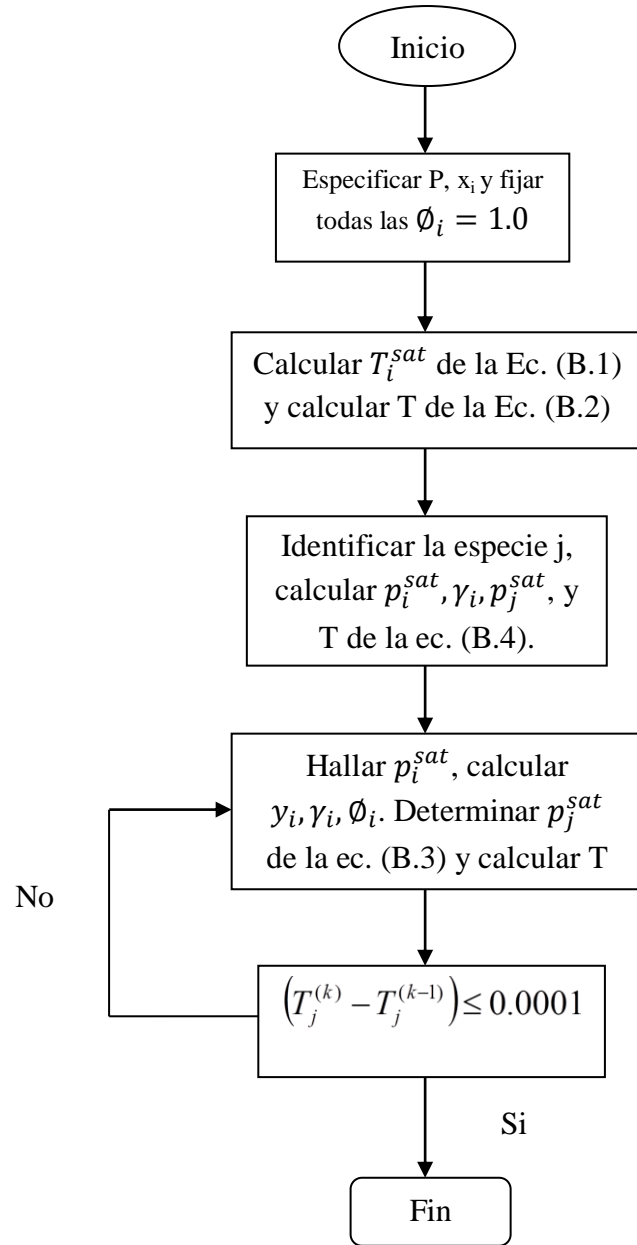
Para el cálculo de las temperaturas de saturación etapa a etapa se utilizaron las ecuaciones de punto burbuja, donde se sigue el siguiente algoritmo:

$$T = \sum_i x_i T_i^{sat} \quad Ec.(B.2)$$

$$P_j^{sat} = P \sum_i \frac{y_i \phi_i \left(\frac{P_j^{sat}}{P_i^{sat}} \right)}{\gamma_i} \quad Ec.(B.3)$$

$$T = \frac{B_j}{A_j - \ln(P_j^{sat})} - C_j \quad Ec.(B.4)$$

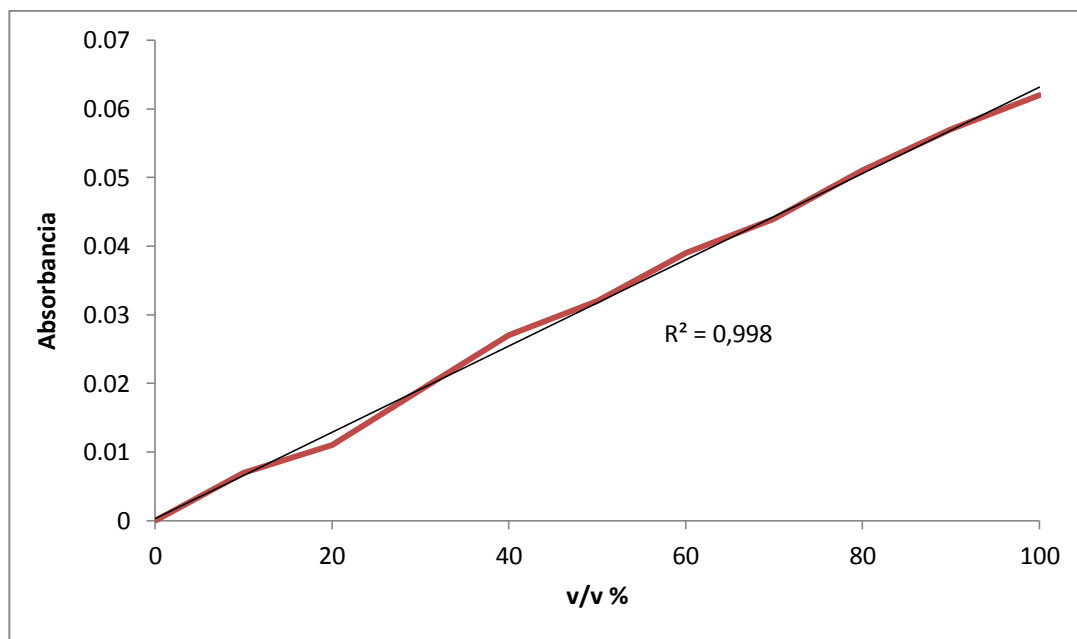
Figura B.1. Algoritmo de punto de burbuja.



Fuente: Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química [19].

ANEXO C

Figura C.1. Curva de calibración



Fuente: Elaborada en la presente investigación

En la siguiente tabla se muestran los datos de absorbancia obtenidos del espectrofotómetro para la construcción de la curva de calibración:

Tabla C.1. Datos de Absorbancia

Absorbancia	v/v%
0	0
0,007	10
0,011	20
0,019	30
0,027	40
0,032	50
0,039	60
0,044	70
0,051	80
0,057	90
0,062	100

Fuente: Elaborada en la presente investigación.

ANEXO D

Ecuaciones y parámetros del modelo termodinámico UNIFAC

$$J_i = \frac{r_i}{\sum_j (r_j x_j)} \quad Ec.(D.1) \quad L_i = \frac{q_i}{\sum_j (q_j x_j)}$$

$$Ec.(D.2)$$

$$r_i = \sum_k v_k^{(i)} R_k \quad Ec.(D.3) \quad q_i = \sum_k v_k^{(i)} Q_k \quad Ec.(D.4)$$

$$e_{ki} = \frac{v_k^{(i)} Q_k}{q_i} \quad Ec.(D.5) \quad \beta_{ik} = \sum_m e_{ki} \tau_{mk} \quad Ec.(D.6)$$

$$\theta_k = \frac{\sum_i e_{ki} x_i q_i}{\sum_j x_j q_j} \quad Ec.(D.7) \quad s_k = \sum_m \theta_m \tau_{mk} \quad Ec.(D.8)$$

$$\tau_{mk} = \exp\left(\frac{-a_{mk}}{T}\right) \quad Ec.(D.9)$$

El subíndice i indica a la especie y j, es un subíndice ficticio que demarca todas las especies. El subíndice k identifica los subgrupos y m es un índice ficticio que recorre todos los subgrupos, la cantidad $v_k^{(i)}$, es el número de subgrupos del tipo k en una molécula de especie i.

Tabla D.1. Parámetros del método UNIFAC

Propiedad	Sub-Grupos			
	CH3	CH2	OH	H2O
R	0.9011	0.6744	1.0000	0.9200
Q	0.8480	0.5400	1.2000	1.4000
$v_k^{(1)}$	1	1	1	0
$v_k^{(2)}$	0	0	0	1

Fuente: Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química [19].

Ecuaciones y parámetros del modelo termodinámico PSRK

$$B_i = 0.08664 \left(\frac{P}{P_{c,i}} \right) \left(\frac{T_{c,i}}{T} \right) \quad \text{Ec. (D.10)}$$

$$A_i = 0.0422748 \left(\frac{P}{P_{c,i}} \right) \left(\frac{T_{c,i}}{T} \right) \cdot f(T) \quad \text{Ec. (D.11)}$$

Si $T_r \leq 1$

$$f(T) = \left[1 + c_1(1 - (T_r)^{0.5}) + c_2(1 - (T_r)^{0.5})^2 + c_3(1 - (T_r)^{0.5})^3 \right]^2 \quad \text{Ec. (D.12)}$$

Si $T_r > 1$

$$f(T) = \left[1 - c_1(1 - (T_r)^{0.5})^3 \right]^2 \quad \text{Ec. (D.13)}$$

$$B_m = \sum y_i \cdot B_i \quad \text{Ec. (D.14)} \quad \frac{A_m}{B_m} = \sum x_i \cdot \frac{A_i}{B_i} + \frac{1}{\wedge} \left[\frac{G^E}{RT} + \sum x_i \cdot \ln \left(\frac{B_m}{B_i} \right) \right] \quad \text{Ec. (D.15)}$$

$$Zm^3 - Zm^2 + (Am - Bm - Bm^2)Zm - AmBm = 0 \quad \text{Ec. (D.16)}$$

$$\frac{G^E}{RT} = \sum x_i \cdot \ln \gamma_i \quad \text{Ec. (D.17)}$$

$$\alpha_i = \frac{1}{\wedge} \left[\ln \gamma_i + \ln \left(\frac{Bm}{B_i} \right) + \frac{B_i}{Bm} - 1 \right] + \frac{A_i}{B_i} \quad \text{Ec. (D.18)} \quad \wedge = \log(1.1/2.1)$$

Al ser una ecuación de estado, este método hace uso de las propiedades críticas de las sustancias a modelar, donde las magnitudes de dichas propiedades son:

Tabla D.2. Propiedades críticas de los componentes

Componente	T _C (K)	P _C (bar)
Etanol	513.9	61.48
Agua	647.15	220.35

Fuente: Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química [18].

Para la correcta aplicación de este método predictivo, fueron necesarios los parámetros de interacción binaria de Mathías - Cooperman, los cuales para la mezcla etanol – agua son:

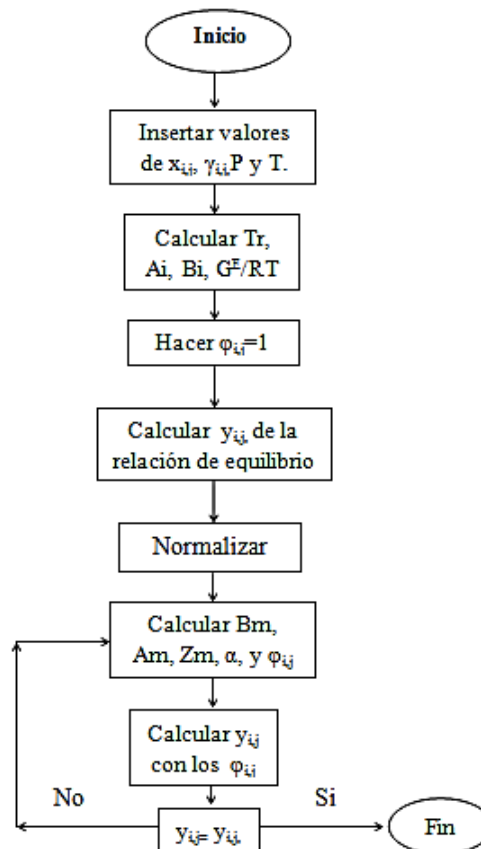
Tabla D.3. Coeficientes de Mathias-Copeman

Sustancia	$C_{i,1}$	$C_{i,2}$	$C_{i,3}$
Etanol (1)	1.208644	0.737714	-2.110861
Agua (2)	1.0783	-0.5832	0.5462

Fuente: Calculation of vapor–liquidequilibria of polymer solutions and gas solubilities in molten polymers based on PSRK equation of state, Estudio comparativo de la predicción de propiedades termodinámicas de sustancias polares con modelos recientes de ecuaciones de estado cúbicas. [24, 25]

El algoritmo utilizado para calcular los coeficientes de fugacidad y las concentraciones de vapor de etanol y agua fue:

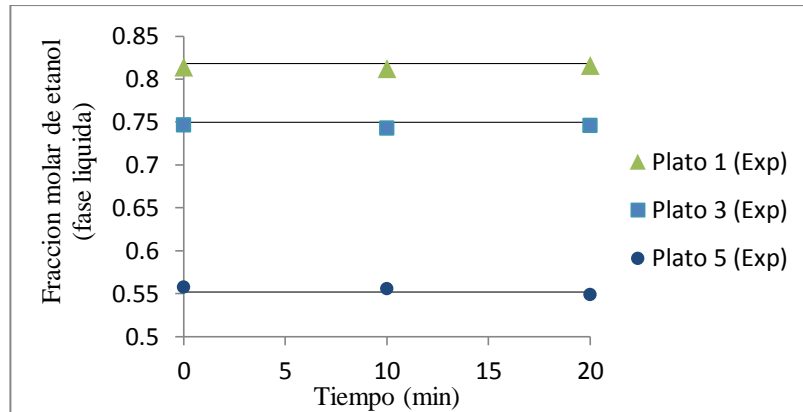
Figura D.1. Algoritmo el cálculo del coeficiente de fugacidad



Fuente: Elaborada en la presente investigación

ANEXO E

Figura. E.1. Comportamiento real y simulado en los platos 1, 3 y 5 para una composición de alimentación de 0.25 molar, operando a reflujo total.



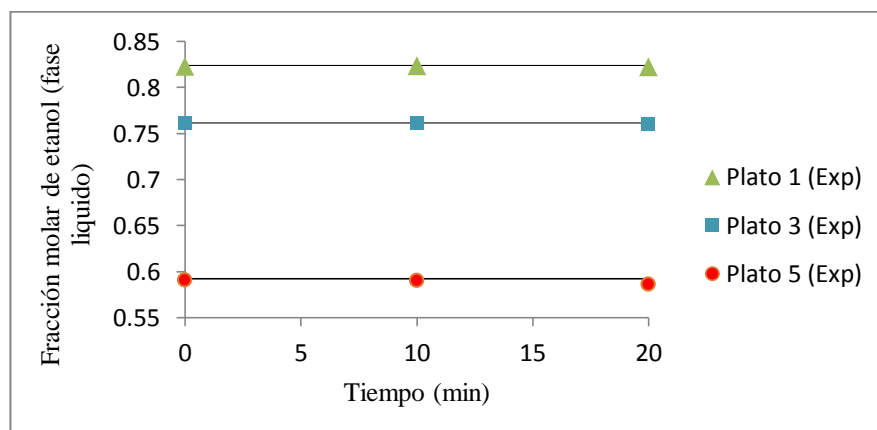
Fuente: Elaborado en la presente investigación

Tabla E.1. Datos reales y simulados en los platos 1, 3 y 5 para una composición de alimentación de 0.25 molar, operando a reflujo total.

t (min)	simulación			Experimental			% Error		
	Etapa			Etapa			Etapa		
	1	3	5	1	3	5	1	3	5
0	0,8181	0,7497	0,552	0,8135	0,7457	0,5573	0,5623	0,5335	0,9601
10	0,8181	0,7497	0,552	0,812	0,7425	0,5551	0,7456	0,9604	0,5616
20	0,8181	0,7497	0,552	0,8157	0,7454	0,5481	0,2934	0,5736	0,7065

Fuente: Elaborado en la presente investigación

Figura E.2. Comportamiento real y simulado en los platos 1, 3 y 5 para una composición de alimentación de 0.35 molar, operando a reflujo total.



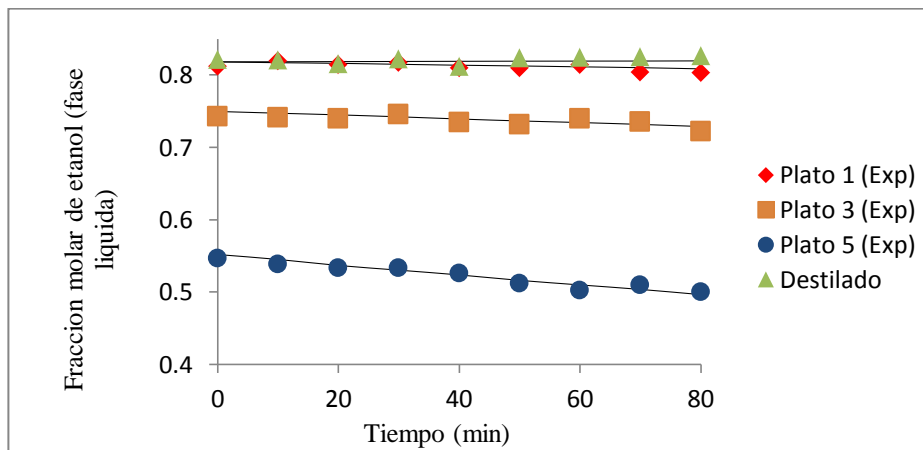
Fuente: Elaborado en la presente investigación.

Tabla E.2.Datos reales y simulados en los platos 1, 3 y 5 para una composición de alimentación de 0.25 molar, operando a reflujo total.

t (min)	simulación			Experimental			% Error		
	Etapa			Etapa			Etapa		
	1	3	5	1	3	5	1	3	5
0	0,8239	0,7615	0,5924	0,8228	0,7605	0,5904	0,1337	0,1315	0,3388
10	0,8239	0,7615	0,5924	0,8231	0,761	0,5899	0,0972	0,0657	0,4238
20	0,8239	0,7615	0,5924	0,8224	0,7599	0,586	0,1824	0,2106	1,0922

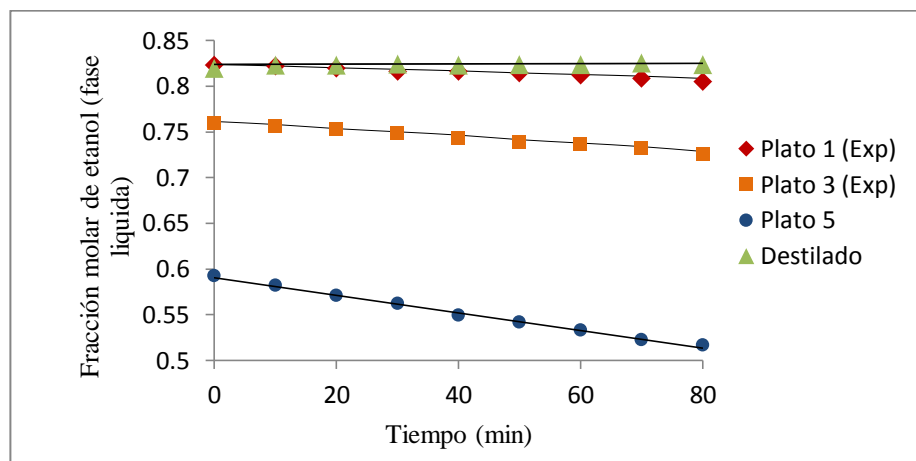
Fuente: Elaborado en la presente investigación.

Figura E.3.Comportamiento real y simulado en los platos 1, 3, 5 y en el producto destilado, para una composición de alimentación de 0.25 molar, operando sin reflujo.



Fuente: Elaborado en la presente investigación.

Figura E.4.Comportamiento real y simulado en los platos 11, 3, 5 y en el producto destilado, para una composición de alimentación de 0.35 molar, operando sin reflujo.



Fuente: Elaborado en la presente investigación

Tabla E.3.Datos reales y simulados para los platos 1, 3 ,5 y destilado, con una carga de alimentación de 0.25 molar, operando sin reflujo.

t (min)	Simulación				Experimental				% Error			
	Etapa				Etapa				Etapa			
	1	3	5	D	1	3	5	D	1	3	5	D
0	0,8181	0,7497	0,5520	0,8181	0,8124	0,7429	0,5469	0,8217	0,6967	0,9070	0,9239	0,4400
10	0,817	0,7472	0,5451	0,8183	0,8195	0,7412	0,5389	0,8209	0,3060	0,8030	1,1374	0,3177
20	0,8161	0,7449	0,5368	0,8185	0,8142	0,7399	0,5335	0,8154	0,2328	0,6712	0,6148	0,3787
30	0,8148	0,7422	0,5303	0,8187	0,8172	0,7455	0,5331	0,8221	0,2946	0,4446	0,5280	0,4153
40	0,8135	0,7392	0,5237	0,8189	0,8099	0,7348	0,5258	0,8124	0,4425	0,5952	0,4010	0,7937
50	0,8125	0,7365	0,5162	0,8191	0,8101	0,7319	0,5121	0,8236	0,2954	0,6246	0,7943	0,5494
60	0,8113	0,7343	0,5099	0,8192	0,8145	0,7399	0,5022	0,8245	0,3944	0,7626	1,5101	0,6470
70	0,8101	0,7317	0,5037	0,8193	0,8036	0,7355	0,5098	0,8252	0,8024	0,5193	1,2110	0,7201
80	0,8085	0,7288	0,4965	0,8195	0,8032	0,7219	0,5001	0,8268	0,6555	0,9468	0,7251	0,8908

Fuente: Elaborado en la presente investigación

Tabla E.4.Datos reales y simulados para los platos 1, 3 ,5 y destilado, con una carga de alimentación de 0.35 molar, operando sin reflujo

t (min)	Simulación				Experimental				% Error			
	Etapa				Etapa				Etapa			
	1	3	5	D	1	3	5	D	1	3	5	D
0	0,8239	0,7615	0,5924	0,8239	0,8225	0,7587	0,5925	0,8195	0,1702	0,3691	0,0169	0,5369
10	0,8223	0,7582	0,583	0,8241	0,8219	0,7554	0,5819	0,8225	0,0487	0,3707	0,1887	0,1945
20	0,8202	0,7537	0,5711	0,8243	0,8195	0,7525	0,5704	0,8228	0,0854	0,1595	0,1226	0,1823
30	0,8186	0,7502	0,5624	0,8244	0,8156	0,7485	0,5617	0,8237	0,3678	0,2271	0,1245	0,0850
40	0,8169	0,7466	0,554	0,8245	0,8158	0,7423	0,549	0,823	0,1348	0,5793	0,9025	0,1823
50	0,8146	0,7416	0,5432	0,8247	0,8138	0,7385	0,5418	0,8234	0,0983	0,4198	0,2577	0,1579
60	0,8129	0,7379	0,5354	0,8247	0,8118	0,7367	0,5326	0,8235	0,1355	0,1629	0,5230	0,1457
70	0,8111	0,734	0,5277	0,8248	0,808	0,732	0,5225	0,8254	0,3837	0,2732	0,9854	0,0727
80	0,8086	0,7287	0,5178	0,8249	0,8045	0,7245	0,5165	0,8235	0,5096	0,5797	0,2511	0,1697

Fuente: Elaborado en la presente investigación

Tabla E5.Datos reales y simulados para los platos 1, 3 ,5 y destilado, con carga de alimento 0.15 molar, operando sin reflujo.

T (min)	Simulación				Experimental				% Error			
	Etapa				Etapa				Etapa			
	1	3	5	D	1	3	5	D	1	3	5	D
0	0,8109	0,7354	0,4993	0,811	0,8141	0,7399	0,5025	0,8215	0,3946	0,6119	0,6409	1,2947
10	0,8095	0,732	0,4885	0,8114	0,8136	0,7362	0,4835	0,8187	0,5065	0,5738	1,0235	0,8997
20	0,808	0,7278	0,4752	0,8118	0,8126	0,734	0,4783	0,81	0,5693	0,8519	0,6524	0,2217
30	0,8063	0,7243	0,465	0,8122	0,8012	0,7307	0,4605	0,8079	0,6325	0,8836	0,9677	0,5294
40	0,8049	0,7207	0,4551	0,8125	0,798	0,7289	0,4529	0,8195	0,8572	1,1378	0,4834	0,8615
50	0,8031	0,7165	0,4428	0,8128	0,7978	0,7211	0,4492	0,8157	0,6599	0,6420	1,4453	0,3568
60	0,8014	0,7125	0,4333	0,8131	0,7969	0,7188	0,4352	0,8174	0,5615	0,8842	0,4385	0,5288
70	0,7997	0,708	0,4239	0,8133	0,7943	0,703	0,4278	0,8101	0,6753	0,7062	0,9200	0,3935
80	0,798	0,7043	0,4125	0,8135	0,7957	0,7011	0,4103	0,8211	0,2882	0,4544	0,5333	0,9342

Fuente: Elaborado en la presente investigación

Tabla E6.Datos reales y simulados para los platos 1, 3 ,5 y destilado, con carga de alimento 0.4 molar, operando sin reflujo

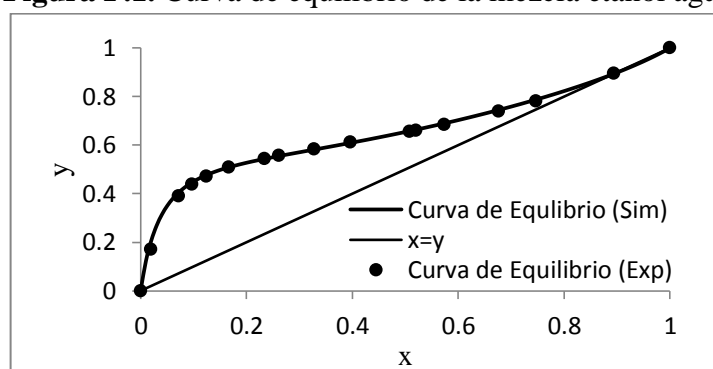
T (min)	Simulación				Experimental				% Error			
	Etapa				Etapa				Etapa			
	1	3	5	D	1	3	5	D	1	3	5	D
0	0,8269	0,7678	0,6126	0,8269	0,8235	0,7623	0,613	0,8253	0,4129	0,7215	0,0653	0,1939
10	0,8248	0,7634	0,6007	0,8271	0,8232	0,7615	0,598	0,8268	0,1944	0,2495	0,4515	0,0363
20	0,8219	0,7573	0,5856	0,8273	0,8215	0,7554	0,5825	0,8259	0,0487	0,2515	0,5322	0,1695
30	0,8196	0,7525	0,5747	0,8274	0,8154	0,7519	0,5732	0,8234	0,5151	0,0798	0,2617	0,4858
40	0,8173	0,7476	0,5643	0,8276	0,8138	0,7464	0,5625	0,8225	0,4301	0,1608	0,3200	0,6201
50	0,814	0,7408	0,5509	0,8277	0,812	0,7402	0,551	0,8264	0,2463	0,0811	0,0181	0,1573
60	0,8115	0,7356	0,5412	0,8277	0,8107	0,7324	0,5404	0,8248	0,0987	0,4369	0,1480	0,3516
70	0,809	0,7302	0,5318	0,8278	0,807	0,7295	0,5315	0,8224	0,2478	0,0960	0,0564	0,6566
80	0,8054	0,7229	0,5197	0,8278	0,8027	0,7254	0,5148	0,8215	0,3364	0,3446	0,9518	0,7669

Fuente: Elaborado en la presente investigación

ANEXO F

La Figura F.1 muestra la curva de equilibrio del sistema etanol agua, la línea continua representa los datos simulados, y los puntos lo datos experimentales para una atmosfera de presión. Puede verse que a medida la concentración de etanol se aumenta la relación de equilibrio se angosta debido a la presencia de un azeótropo a la composición de 0,8943. La Tabla F1 muestra las desviaciones de la temperatura y la fracción de vapor de etanol del modelo termodinámico con respecto a datos experimentales.

Figura F.1. Curva de equilibrio de la mezcla etanol agua



Fuente: Elaborado en la presente investigación

Tabla F1. Datos de equilibrio simulados y experimentales de la mezcla etanol-agua

Datos Experimentales			Datos Simulados		Errores Absolutos	
x_1	y_1	T (K)	y_1	T (K)	y_1 (%)	T (%)
0,019	0,17	368,65	0,1976	367,4196	16,6470	0,3337
0,0721	0,3891	362,15	0,4035	360,5228	4,0092	0,4493
0,0966	0,4375	359,85	0,4444	359,0506	1,7371	0,2221
0,1238	0,4704	358,45	0,475	357,934	1,1054	0,1439
0,1661	0,5089	357,25	0,5071	356,7791	0,2554	0,1318
0,2337	0,5445	355,85	0,5418	355,604	0,4040	0,0691
0,2608	0,558	355,45	0,5534	355,2409	0,7526	0,0588
0,3273	0,5826	354,65	0,5799	354,4716	0,3776	0,0503
0,3965	0,6122	353,85	0,6077	353,7756	0,6697	0,0210
0,5079	0,6564	352,95	0,6561	352,7976	0,0304	0,0431
0,5198	0,6599	352,85	0,6617	352,7027	0,3333	0,0417
0,5732	0,6841	352,45	0,6877	352,3006	0,5847	0,0423
0,6763	0,7385	351,89	0,7431	351,6447	0,6905	0,0697
0,7472	0,7812	351,56	0,7861	351,2992	0,8192	0,0741
0,8943	0,8943	351,3	0,8932	350,941	0,0894	0,1021

Fuente: Elaborado en la presente investigación, los datos experimentales fueron sacados del Manual del Ingeniero Químico [26].