

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Facultad de Ingeniería



Diseño de un simulador para la operación tipo batch de la
Torre de Destilación del Laboratorio de Operaciones
Unitarias de la Universidad del Valle de Guatemala para
separación de etanol de mezclas etanol-agua

Trabajo de graduación presentado por
Mónica Lucía Sandoval Osorio
para optar al grado académico de Licenciada en Ingeniería Química
Industrial

Guatemala
2022

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Facultad de Ingeniería

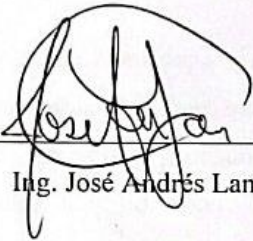


Diseño de un simulador para la operación tipo batch de la
Torre de Destilación del Laboratorio de Operaciones
Unitarias de la Universidad del Valle de Guatemala para
separación de etanol de mezclas etanol-agua

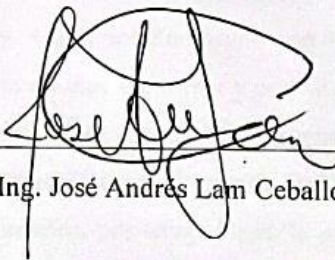
Trabajo de graduación presentado por
Mónica Lucía Sandoval Osorio
para optar al grado académico de Licenciada en Ingeniería Química
Industrial

Guatemala
2022

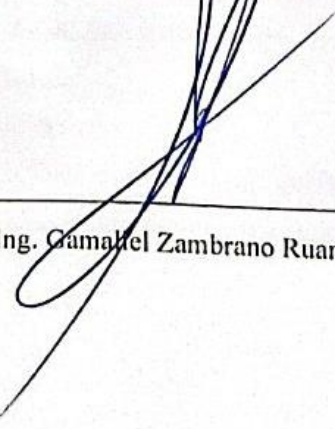
Vo. Bo.:

(f) 
Ing. José Andrés Lam Ceballos

TRIBUNAL EXAMINADOR

(f) 
Ing. José Andrés Lam Ceballos

(f) 
Ing. Carmen Alicia Ortiz Pineda

(f) 
Ing. Gamahel Zambrano Ruano

Fecha de aprobación: Guatemala, 27 de octubre de 2022

PREFACIO

Dedico este trabajo de graduación a mi papá y a mi mamá, que siempre me apoyaron durante la carrera. También a mi abuelito César, que me apoyó en muchas de las actividades de la carrera para poder entregar un trabajo profesional. A mis hermanas, Rocío y Cristina, que sin su apoyo no podría haber cumplido con todos los trabajos de la carrera y en especial este.

Agradezco a mi asesor, el Ing. José Andrés Lam, por su paciencia y por su consejo en la realización de este trabajo de graduación. También a mi profesora de curso, Ing. Carmen Ortiz, por su paciencia y brindarme su conocimiento para realizar los cálculos de transferencia de calor. Al Ing. Gamaliel Zambrano por brindarme su apoyo al trabajar dentro del Laboratorio de Operaciones Unitarias y por su consejo durante toda la carrera universitaria. También agradezco a los técnicos de laboratorio, José, Chapo y Héctor por ayudarme en la operación y reparación de la Torre de Destilación. También a la secretaria del departamento, Verónica Jiménez, por su apoyo en la papelería de protocolo y examen de tesis, y a Melisa Paredes, porque me daba la cristalería que necesitaba en las pruebas experimentales.

Agradezco a todos los profesores que tuve en mi carrera universitaria, porque me ayudaron a formarme como una profesional.

Agradezco a mis amigos de la carrera, Ali, Jeffrey, Mario, Lourdes, Gaby, Leo, Bea y Pao, y a mis amigas de la infancia, Anna, July y Anamer por su amistad incondicional y porque me animaron a continuar con la tesis.

Y más que todo, agradezco a Dios por darme la oportunidad de culminar mi carrera universitaria a pesar de todo lo que pasó durante la pandemia de COVID-19 durante los años 2020-2022.

ÍNDICE

LISTA DE CUADROS	viii
LISTA DE FIGURAS	x
RESUMEN	xii
I. INTRODUCCIÓN	1
II. OBJETIVOS	3
A. Objetivo general	3
B. Objetivos específicos	3
III. JUSTIFICACIÓN.....	4
IV. MARCO TEÓRICO	6
A. Destilación	6
1. Proceso de destilación.....	6
2. Funcionamiento y partes de una torre de destilación continua.....	8
3. Método Ponchon y Savarit.....	10
4. Azeótropo.....	21
B. Índice de refracción	24
C. Determinación de equilibrio vapor-líquido.....	25
D. Transferencia de calor	26
1. Conducción	26
2. Radiación	27
E. Análisis estadístico con Prueba F.....	28
F. Simuladores.....	29
1. Importancia de un simulador.....	29
2. Tipos de simuladores	29
3. Partes de un simulador.....	30
4. Variables	31
5. Programas existentes.....	32
6. Uso de Microsoft Excel con macros	34
V. METODOLOGÍA	37
A. Curva de calibración de concentración e índice de refracción.	37
B. Datos de equilibrio vapor-líquido experimentales.....	38

C.	Preparación y operación de la Torre de Destilación.....	40
VI.	RESULTADOS.....	43
VII.	ANÁLISIS DE RESULTADOS	46
VIII.	CONCLUSIONES.....	55
IX.	RECOMENDACIONES.....	56
X.	BIBLIOGRAFÍA.....	57
XI.	ANEXOS	61
XII.	GLOSARIO	103

LISTA DE CUADROS

Cuadro 1. Ecuaciones del sistema global de una torre de destilación.	11
Cuadro 2. Ecuaciones del sistema global de una torre de destilación.	13
Cuadro 3. Ecuaciones para la determinación de las entalpías líquidas y gaseosas.	13
Cuadro 4. Datos de equilibrio de temperatura y fracción molar en la fase líquida y gaseosa del sistema Etanol-Agua.	23
Cuadro 5. Ecuaciones involucradas en el método de UNIFAC.	27
Cuadro 6. Ecuaciones de transferencia de calor por medio de conducción y radiación.	28
Cuadro 7. Materiales para el procedimiento de Curva de calibración de concentración e Índice de refracción.	37
Cuadro 8. Materiales para el procedimiento de Datos de equilibrio vapor líquido experimentales.	38
Cuadro 9. Materiales para el procedimiento de Preparación y Operación de la Torre de Destilación.	40
Cuadro 10. Concentraciones en la fase líquida, x , y en la fase vapor, y , del sistema etanol-agua por medio de Raoult modificado y el coeficiente de actividad del método UNIFAC.	43
Cuadro 11. Resultados experimentales y del simulador de diferentes corridas.	44
Cuadro 12. Análisis estadístico de los resultados obtenidos por la Torre de Destilación y del simulador.	45
Cuadro 13. Índice de refracción de diferentes soluciones de etanol-agua.	61
Cuadro 14. Medición de índice de refracción de muestras obtenidas en cada plato durante la operación de la corrida del 24 de junio, 2022.	62
Cuadro 15. Medición de índice de refracción de muestras obtenidas en cada plato durante la operación de la corrida del 28 de junio, 2022.	62
Cuadro 16. Medición de índice de refracción de muestras obtenidas en cada plato durante la operación de la corrida del 19 de julio, 2022.	63
Cuadro 17. Medición de índice de refracción de muestras obtenidas en cada plato durante la operación de la corrida del 26 de julio, 2022.	63
Cuadro 18. Medición de índice de refracción de muestras obtenidas en cada plato durante la operación de la corrida del 02 de agosto, 2022.	64
Cuadro 19. Medición de índice de refracción de muestras obtenidas en cada plato durante la operación de la corrida del 22 de agosto, 2022.	64

Cuadro 20. Análisis estadístico con Prueba F de los valores obtenidos para la curva de calibración.	65
Cuadro 21. Análisis estadístico con Prueba F de los valores de la fase líquida para la gráfica EVL obtenidos en las destilaciones simples	65
Cuadro 22. Análisis estadístico con Prueba F de los resultados obtenidos en las corridas de la Torre de Destilación.....	66

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Equilibrio vapor-líquido de una mezcla binaria.....	7
Figura 2. Equilibrio vapor-líquido de una mezcla binaria a presión constante (izquierda) y temperatura constante (derecha).	8
Figura 3. Diagrama de una torre de destilación con un rehervidor.	9
Figura 4. Vista lateral de platos con campanas de una torre de destilación.....	10
Figura 5. Diagrama de Flujo de operación de Torre de Destilación del Laboratorio de Operaciones Unitarias.	12
Figura 6. Curvas de entalpía HL y HG, con sus líneas de unión, del sistema disulfuro de carbono y tetracloruro de carbono.....	14
Figura 7. Líneas arbitrarias de ΔD y determinación de la curva de operación de enriquecimiento.	16
Figura 8. Líneas arbitrarias de ΔW y determinación de la curva de operación de agotamiento. ... (Treybal, 1980)	17
Figura 9. Curva de operación completa y trazado de platos.	18
Figura 10. Adelgazamiento al colocar la alimentación un plato después (izquierda) y antes (derecha).	19
Figura 11. Determinación de puntos mínimos de la línea F, que pasa por F, ΔD_{\min} y ΔW_{\min}	20
Figura 12. Determinación de ΔD_{\min} en sistemas con desviación positiva (izquierda) y determinación de ΔD_{\min} en sistemas con desviación negativa (derecha).	21
Figura 13. Ejemplos de azeótropos. (Izquierda) Ebullición mínima de Cloroformo-Tetrahidrofurano y (Derecha) Etanol-Tolueno. (Smith, <i>et al.</i> , 2007)	22
Figura 14. Equilibrio del sistema Etanol-Agua en fracciones molares de líquido y vapor.	23
Figura 15. Relación entre la fracción másica de etanol en una solución y el índice de refracción.	25
Figura 16. Interfaz de usuario de ChemCad.	32
Figura 17. Interfaz de usuario de ChemSep.....	33
Figura 18. Interfaz de usuario de Aspen Plus.	33
Figura 19. Grabación de macros.	34
Figura 20. Código de una macro en Microsoft Excel vía VBA.	35
Figura 21. Distribución de concentraciones en la fase líquida y vapor del sistema etanol-agua. ...	43
Figura 22. Comparación de equilibrio vapor-líquido de 1 atm teórica y 0.97 atm experimental. .	44
Figura 23. Relación entre índice de refracción y concentración molar en la fase líquida.	61

Figura 24. Mapa de proceso e introducción de variables.	67
Figura 25. Diagrama de platos con curva de equilibrio, curva de operación y recta diagonal.	68
Figura 26. Determinación de líneas arbitrarias para la determinación de la curva de operación... ..	68
Figura 27. Determinación de puntos para la curva de operación.	69
Figura 28. Determinación de platos de operación y el plato de alimentación.	69
Figura 29. Plano del calderín vista lateral.	70
Figura 30. Plano del calderín vista frontal.....	71
Figura 31. Plano de platos vista lateral.....	72
Figura 32. Plano de platos vista frontal.....	73
Figura 33. Plano de torre de platos vista lateral.....	74
Figura 34. Plano de torre de platos vista frontal.	75
Figura 35. Plano de condensador vista lateral.	76
Figura 36. Plano de red de destilados.....	77
Figura 37. Plano de red de alimentación.	78

RESUMEN

El presente Trabajo de Graduación consiste en el diseño de un simulador para la Torre de Destilación del Laboratorio de Operaciones Unitarias que opera en formato batch utilizando una solución binaria de etanol y agua.

Se determinaron valores experimentales como una curva de calibración que relaciona la concentración volumétrica y molar con el índice de refracción, y una curva de equilibrio de vapor-líquido de acuerdo con la presión absoluta del Laboratorio de Operaciones Unitarias.

Se realizó un simulador que toma datos de operación como temperaturas, flujos y concentraciones para calcular la concentración final de destilados y colas, y el plato de alimentación ideal para obtener esas concentraciones esperadas.

Se hizo un balance de masa de acuerdo con las condiciones iniciales y un balance de energía a la Torre de Destilación ya que este no se encuentra aislado con respecto al ambiente. Se determinaron las pérdidas por conducción y radiación, considerando que todo el equipo es de acero inoxidable y que el Laboratorio de Operaciones Unitarias es un cuerpo negro.

Se redactó un Manual de Usuario como complemento al simulador para ayudar al usuario en la operación de la Torre de Destilación y en la operación del simulador.

I. INTRODUCCIÓN

La destilación es una de las operaciones unitarias más utilizadas en la industria. Es un proceso cuyo objetivo es separar los compuestos de una mezcla líquida miscible de acuerdo con sus volatilidades y de esta forma purificar las sustancias líquidas. La volatilidad es la capacidad que tiene un compuesto para cambiar de estado líquido a estado gaseoso. A escala laboratorio, la destilación es una práctica de purificación sencilla que trabaja con cargas pequeñas y que permite conocer las propiedades termodinámicas de los compuestos que conforman la mezcla. La destilación se utiliza en diferentes industrias, como en la obtención de reactivos volátiles, obtención de bebidas alcohólicas, producción de aceites esenciales, refinamiento de petróleo y otros productos petroquímicos.

El proceso de destilación, como se mencionó anteriormente, consiste en la separación de componentes de una solución de acuerdo con su distribución en una fase líquida y otra gaseosa a una temperatura específica. Las curvas de equilibrio dependen de las composiciones del líquido y del gas, la presión y la temperatura. La operación de la torre consiste en una sección de enriquecimiento, donde se encuentra la mayor concentración del componente más volátil, y una sección de agotamiento, donde se encuentra la mayor concentración del componente menos volátil. Las soluciones pueden ser ideales, en el que las presiones de vapor de los componentes son diferentes, o no ideales, en las que se pueden mencionar las desviaciones positivas y negativas, como los azeótropos.

Para cualquier proceso de destilación, el primer paso es el dimensionamiento del equipo. Un buen dimensionamiento provee muchas ventajas como aprovechamiento de espacio, presupuesto, reactivos y equipos auxiliares. En una operación de una Torre de Destilación, se requieren de equipos auxiliares como una Caldera y una Torre de Enfriamiento. Si la torre de platos tiene un buen diseño, el vapor que se genera en la Caldera y el agua de la Torre de Enfriamiento serán aprovechadas de mejor manera. El dimensionamiento de una Torre de Destilación puede realizarse por dos métodos, McCabe Thiele y Ponchon y Savarit. El primer método se puede utilizar como una aproximación a la cantidad de platos que requiere la Torre de Destilación para cierta operación. El segundo es el método más exacto, ya que considera la entalpía de la fase líquida y gaseosa para tener una mejor aproximación de la curva de operación. Además, se utiliza más en mezclas no ideales. El sistema de etanol-agua tiene un azeótropo a 78.2°C con una concentración a 89.4% molar, a una presión constante de 1 atm.

Actualmente, se utilizan programas o simuladores que facilitan o automatizan los cálculos, operaciones o dimensionamientos de un proceso. Estos programas se utilizan en operaciones de gran escala como método de ahorro de tiempo y evitar el error humano. Los simuladores son programas de computadora que ejecutan una simulación de un proceso de acuerdo con las condiciones especificadas y de esta forma, permiten visualizar y analizar los resultados para la toma de decisiones o para conocer el funcionamiento de un equipo. En ingeniería Química, el uso de simuladores ha sido una técnica de gran apoyo para la solución de problemas en las diferentes operaciones unitarias de la industria, ya que estas dependen de complejas ecuaciones matemáticas y repetición de fórmulas

El propósito del presente trabajo es realizar la propuesta de un simulador para la Torre de Destilación del Laboratorio de Operaciones Unitarias de la Universidad del Valle de Guatemala. Se determinará la curva de equilibrio vapor-líquido de la mezcla etanol-agua a la presión atmosférica del laboratorio. El simulador se utilizará para determinar el plato de alimentación en operaciones con diferentes concentraciones de alimentación para verificar su funcionamiento.

II. OBJETIVOS

A. Objetivo general

Elaborar un programa de simulación para la operación tipo batch de la Torre de Destilación del Laboratorio de Operaciones Unitarias de la Universidad del Valle de Guatemala para la determinación del plato de alimentación para mezclas etanol-agua.

B. Objetivos específicos

- Obtener los datos de equilibrio etanol-agua de acuerdo con la presión atmosférica del Laboratorio de Operaciones Unitarias por medio de corridas en la Torre de destilación.
- Determinar el plato de alimentación según los parámetros de operación de concentración inicial, de los destilados y de los residuos por medio del método de Ponchon y Savarit.
- Proponer un manual de operación digital para el simulador de la Torre de Destilación.

III. JUSTIFICACIÓN

El proceso de destilación consiste en la separación de componentes de una solución de acuerdo con su distribución en una fase líquida y otra gaseosa. Las curvas de equilibrio dependen de las composiciones del líquido y del gas, la presión y la temperatura. A diferencia de otros procesos de separación, la destilación utiliza los mismos componentes para lograr la concentración del componente más volátil. Las soluciones pueden ser ideales, en el que las presiones de vapor de los componentes son diferentes, o no ideales, en las que se pueden mencionar las desviaciones positivas y negativas, como los azeótropos. El dimensionamiento de una torre de destilación se puede hacer por medio de dos métodos, los cuales son Ponchon y Savarit, y McCabe-Thiele. El método de Ponchon y Savarit toma en consideración la entalpía de la fase líquida y gaseosa, por lo que las curvas de agotamiento y enriquecimiento no son líneas rectas, sino curvas, y realiza una mejor aproximación de la curva de operación para mezclas no ideales (Treybal, 1980).

El dimensionamiento da como resultado la curva de operación, el número de platos teóricos, incluyendo el rehervidor, y el plato de alimentación. Este último debe ser el correcto para prevenir el fenómeno de adelgazamiento. Al desarrollar la curva de operación, se prefiere que esta esté alejada de la curva de equilibrio para obtener una menor cantidad de platos teóricos. Al alimentar la torre de destilación un plato antes o después del calculado, ocurre el adelgazamiento, el cual consiste en que la curva de operación se acerca a la curva de equilibrio y resulte en un mayor número de platos teóricos. En una torre de destilación con platos fijos, esto se representa un uso ineficiente de la carga térmica del rehervidor y del condensador (Treybal, 1980).

Los simuladores son programas de computadora que ejecutan una simulación de un proceso de acuerdo con las condiciones especificadas y de esta forma, permiten visualizar y analizar los resultados para la toma de decisiones o para conocer el funcionamiento de un equipo. El uso de simuladores en la industria ha sido de mucho beneficio, ya que permiten optimizar recursos, reducir costos fijos o variables, identificar errores o restricciones, determinación de condiciones extremas, entre otros. En ingeniería Química, el uso de simuladores ha sido una técnica de gran apoyo para la solución de problemas en las diferentes operaciones unitarias de la industria, ya que estas dependen de complejas ecuaciones matemáticas y repetición de fórmulas (León, 2013).

La Torre de Destilación del Laboratorio de Operaciones Unitarias es uno de los equipos que se utiliza en el laboratorio y donde se pueden aplicar la mayor cantidad de conocimientos

aprendidos en el transcurso de la carrera de Ingeniería Química y Química Industrial. Está compuesta de 10 platos físicos, un rehervidor o calderín que utiliza el vapor de una caldera, y un condensador en la parte superior que utiliza agua de la torre de enfriamiento. Se utiliza para la separación de diferentes mezclas binarias para fines didácticos, especialmente para las soluciones de etanol-agua. La operación de la Torre de Destilación requiere de mucha atención de parte de los operarios, por lo que puede incidir errores si no se sabe la forma de trabajar de la torre. Cabe mencionar que el laboratorio tiene una presión atmosférica de aproximadamente 0.97 atm, por lo que los datos teóricos del equilibrio líquido-vapor referenciados a 1 atm no se pueden acoplar a su operación. Ya que el sistema existente tiene un número de platos fijos, el dimensionamiento consistirá en la determinación del plato de alimentación apropiado para la composiciones iniciales y finales de la separación.

IV. MARCO TEÓRICO

A. Destilación

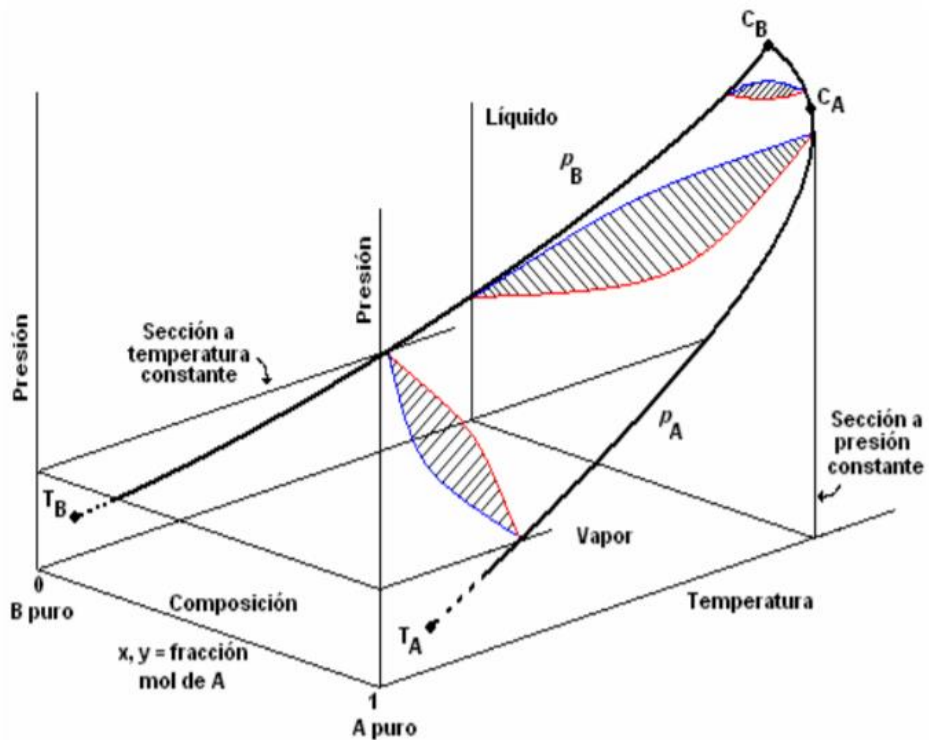
1. Proceso de destilación

La destilación es un método de separación de componentes de una solución, en base a su distribución entre una fase líquida y otra gaseosa. Los componentes de la solución son apreciablemente volátiles, por lo que se debe manipular adecuadamente las fases por medio de evaporaciones o condensaciones repetidas para obtener una separación lo más completa posible o hasta una determinada concentración (Treybal, 1980).

A diferencia de otros métodos de separación, la destilación no requiere de la introducción de una sustancia extraña para propiciar la formación de una nueva fase, ya que son los mismos componentes de la mezcla los que cambian de fase debido a su presión parcial y a la temperatura. Sin embargo, la destilación no tiene la opción de elegir el gas que arrastre el compuesto de interés. En algunos casos, la destilación no es favorable como método de separación, ya que la fase gaseosa y la líquida pueden ser muy similares químicamente y la diferencia de composición entre las dos fases no sea muy grande (Treybal, 1980).

Los datos de equilibrio vapor-líquido son necesarios para comprender la distribución de las fases y se basan en la concentración de la fase líquida y gaseosa, la temperatura y la presión, como se muestra en la Figura 1 para una mezcla de dos componentes. Las curvas p_A y p_B son las presiones de vapor de ambos componentes, y encierran la superficie en que las concentraciones pasan de 0 a 1.0. El área sombreada de lado izquierdo representa el equilibrio vapor-líquido a una presión constante, mientras que la del lado derecho es a una temperatura constante.

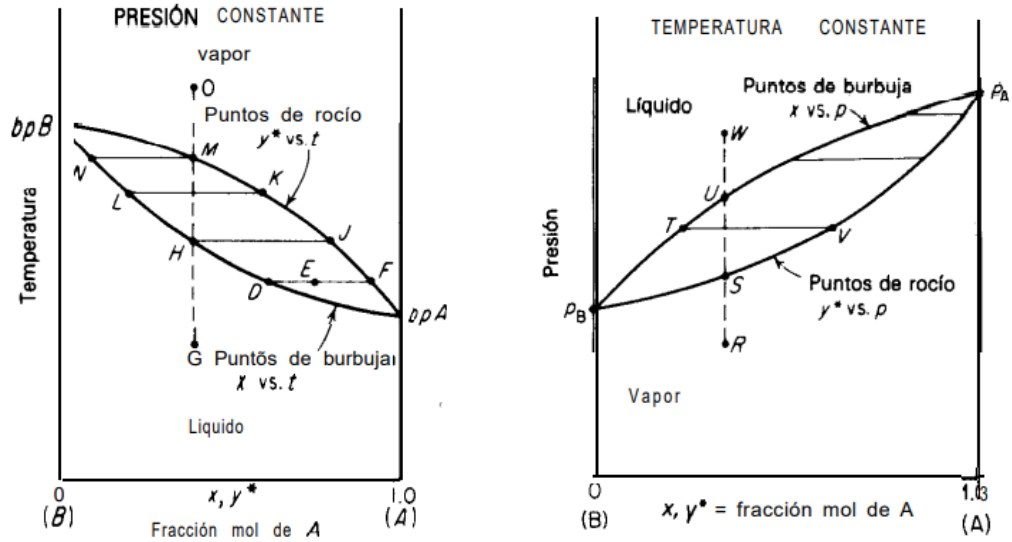
Figura 1. Equilibrio vapor-líquido de una mezcla binaria.



(CIIQ, 2005)

En un diagrama de equilibrio a presión constante, la fase líquida se encuentra en la parte inferior y está limitada por una curva de puntos que se conocen como Puntos de Burbuja. La parte superior de la gráfica es donde se encuentra el vapor y es limitada por los Puntos de Rocío. Cabe mencionar que, al trabajar con presiones más altas, el área del equilibrio depende de las presiones de vapor de los componentes, por lo que la concentración máxima del equilibrio sea menor a la unidad. Una gráfica de equilibrio a temperatura constante se diferencia de la primera en que la fase líquida y gaseosa intercambian lugares, al igual que sus curvas limitantes.

Figura 2. Equilibrio vapor-líquido de una mezcla binaria a presión constante (izquierda) y temperatura constante (derecha).



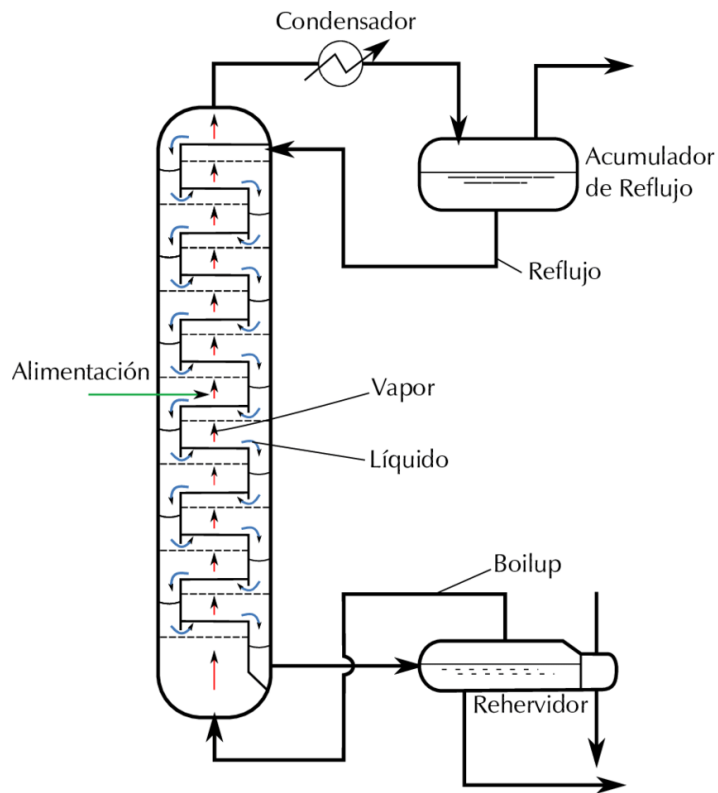
(Treybal, 1980)

La destilación se realiza en torres de destilación, las cuales están compuestas de platos, y pueden tener equipos adicionales para un mejor funcionamiento como un rehervidor, uso de vapor vivo, un condensador, entre otros.

2. Funcionamiento y partes de una torre de destilación continua

Una torre de destilación continua está compuesta de tres partes: el rehervidor, el condensador y la torre. El rehervidor es un intercambiador de calor que proporciona calor en la parte inferior de torre para hervir el líquido del fondo y que el vapor suba por la torre. El condensador es un intercambiador de calor que elimina el calor del vapor que sale del plato superior. La salida del condensador se divide en dos, siendo el destilado y el restante que entra nuevamente a la torre como reflujo. La torre es la parte central y está compuesta de platos perforados o con campanas. Por lo tanto, dentro de los platos ocurre una transferencia de materia y energía entre la fase gaseosa que asciende por la torre y la fase líquida que desciende (Diquima, s.f.).

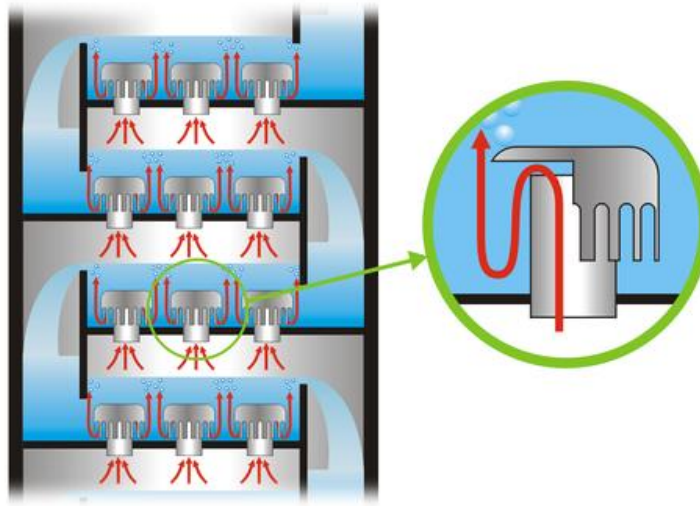
Figura 3. Diagrama de una torre de destilación con un rehervidor.



(León, 2013)

Como se mencionó anteriormente, el vapor de un plato inferior sube al siguiente plato y se incorpora a la fase líquida de este. El calor del rehervidor permite que se evapore el líquido del nuevo plato para subir al siguiente y así sucesivamente hasta que llegar al plato superior. Mientras tanto, la fase líquida cae al plato inferior de una forma controlada. Al llegar al rehervidor, parte del líquido se evapora y el resto sale como residuos o colas. La composición de cada uno de los platos determina la curva de operación.

Figura 4. Vista lateral de platos con campanas de una torre de destilación.



3. Método Ponchon y Savarit

El dimensionamiento de una torre de destilación depende del equilibrio de las fases líquidas y gaseosas, y las composiciones de la alimentación, el destilado y los residuos. El resultado es la determinación de los requerimientos de calor del rehedor y del condensador, y la ubicación del plato de alimentación. El método de Ponchon y Savarit toma en cuenta las entalpías de las fases líquidas y gaseosas para la determinación de la curva de operación de enriquecimiento y agotamiento.

a. Balance de masa, materia y energía

El análisis de la torre de destilación se puede dividir en tres diferentes entornos. La primera es un analizando las entradas y salidas del condensador, para determinar el calor eliminado y el valor del reflujo. La segunda es un análisis del rehedor en el fondo de la torre para conocer el calor agregado y la concentración de las colas. El último, conocido como Sistema Global, encierra la torre completa, por lo que considera solo la alimentación, el destilado y el residuo.

Cuadro 1. Ecuaciones del sistema global de una torre de destilación.

Objeto	Ecuación	No.
Balance de Masa	$F = D + W$	(1)
Balance de Materia	$x_F * F = x_D * D + x_W * W$	(2)
Balance de Energía	$H_F * F + Q_B = H_D * D + H_W * W + Q_C + Q_L$	(3)

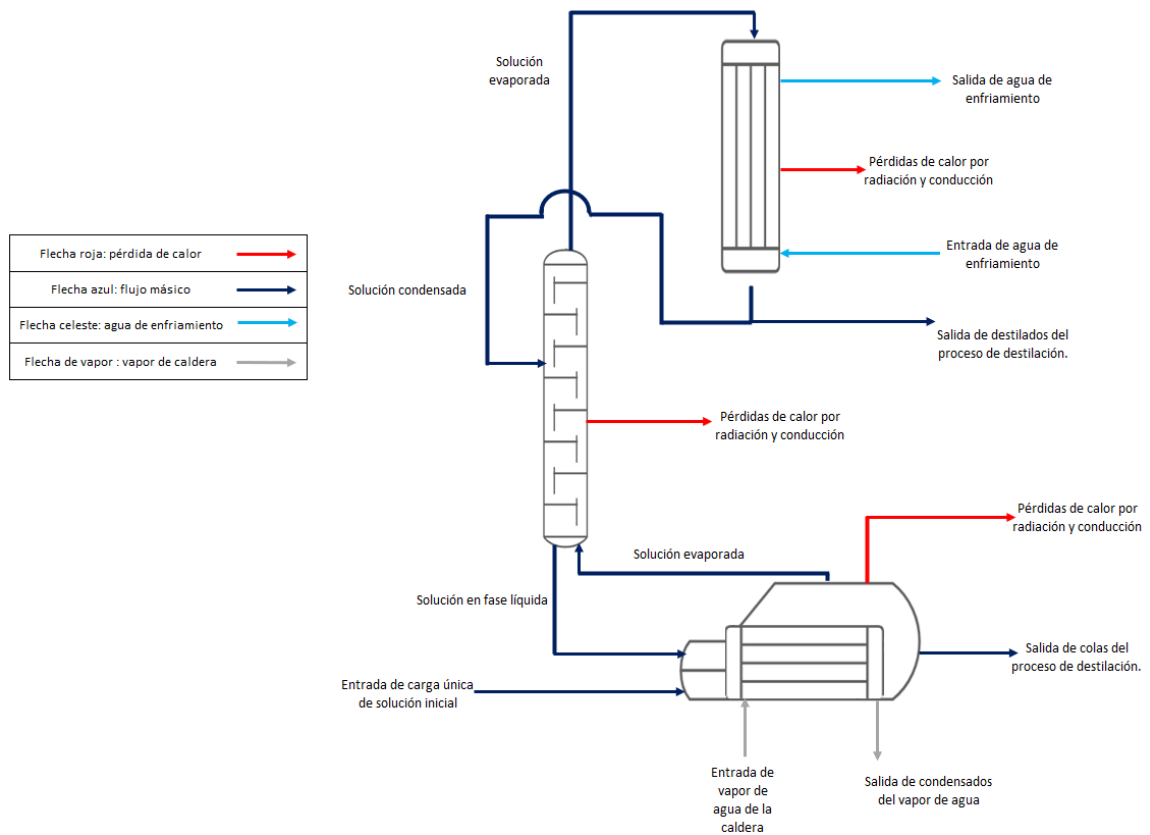
(Treybal, 1980).

En el Cuadro 1, se muestran las ecuaciones de los diferentes balances del sistema global. Las letras F, D y W corresponden a los flujos de la alimentación, destilado y residuo. Las letras x y H hacen referencia a la concentración molar de los flujos y a la entalpía de estos, respectivamente. Los valores Q_B , Q_C y Q_L son el calor agregado del calderín, el calor eliminado del condensador, y las pérdidas de calor que hay en toda la torre, respectivamente. Usualmente el valor de Q_L se puede considerar cercano a cero ya que las torres de destilación se encuentran aisladas del ambiente.

1) Balances y diagrama de flujo de la Torre de Destilación del Laboratorio de Operaciones Unitarias

La Torre de Destilación del Laboratorio de Operaciones Unitarias está compuesta por un calderín, torre de platos y un condensador. El calderín tiene una chaqueta de transferencia de calor para que el vapor de agua que proviene de la caldera caliente de forma indirecta la solución que se carga en el calderín. Por tener una entrada de vapor, el calderín tiene una salida de condensados. El condensador tiene una salida y entrada de agua de enfriamiento, además de su entrada y salida internas de la solución evaporada y condensada, respectivamente. Cabe mencionar que, debido a que la Torre de Destilación opera de forma continua y en forma batch, la alimentación no es un flujo externo, sino que es el reflujo de los destilados. Esto se puede observar en el Diagrama de Flujo Figura 5 que se muestra a continuación. Las flechas azul oscuro indican el flujo de solución, las flechas

Figura 5. Diagrama de Flujo de operación de Torre de Destilación del Laboratorio de Operaciones Unitarias.



Por lo tanto, el balance global de masa y materia de la Torre de Destilación es el balance global. Para el Balance de Energía, se realizó un análisis por equipo, ya que existe una pérdida de energía en las superficies de los equipos por la falta de aislamiento. En la siguiente tabla, se muestran los cálculos teóricos realizados para cada balance. Los diagramas de cada equipo se muestran en las figuras 10, 11 y 12 del Manual del Usuario, el cuál se encuentra en la sección de Anexos del presente trabajo.

Cuadro 2. Ecuaciones del sistema global de una torre de destilación.

Objeto	Ecuación	No.
Balance de Masa	$C = D + W$	(4)
Balance de Materia	$x_C * C = x_D * D + x_W * W$	(5)
Pérdida de energía por conducción	$Q_X = \frac{k\bar{A}_L(T_i - T_o)}{r_o - r_i}$	(6)
Pérdida de energía por radiación	$Q_R = \delta\epsilon A(T^4 - T_C^4)$	(7)
Energía de Vapor	$Q_V = (H_{FV} - H_{FL}) * m_C$	(8)
Energía de Condensados	$Q_C = m_C * Cp * T_C$	(9)
Energía eliminada en el condensador	$Q_{Cond} = m_{Cond} * Cp * (T_{salida} - T_{entrada})$	(10)

(Treybal, 1980)

b. Diagrama de entalpías

El diagrama de entalpías consiste en graficar la entalpía del gas contra la composición del mismo, y la entalpía del líquido con la composición del líquido. Para ello, se debe de calcular las entalpías para cada punto en el equilibrio por medio de las ecuaciones del Cuadro 3.

Cuadro 3. Ecuaciones para la determinación de las entalpías líquidas y gaseosas.

Objeto	Ecuación	No.
Entalpía del líquido	$H_L = x_A * C_{LA} * (T - T_o) + (1 - x_A) * C_{LB} * (T - T_o) + \Delta H_S$	(11)
Entalpía del gas	$H_G = y_A * [C_{LA} * (T - T_o) + \lambda_A] + (1 - x_A) * [C_{LB} * (T - T_o) + \lambda_B]$	(12)
Capacidad Calorífica	$C_{Ln} = C_1 + C_2 * T + C_3 * T^2 + C_4 * T^3 + C_5 * T^4$	(13)
Calor latente	$\lambda_n = C_1 * (1 - T_r)^{C_2 + C_3 * T_r + C_4 * T_r^2 + C_5 * T_r^3}$	(14)

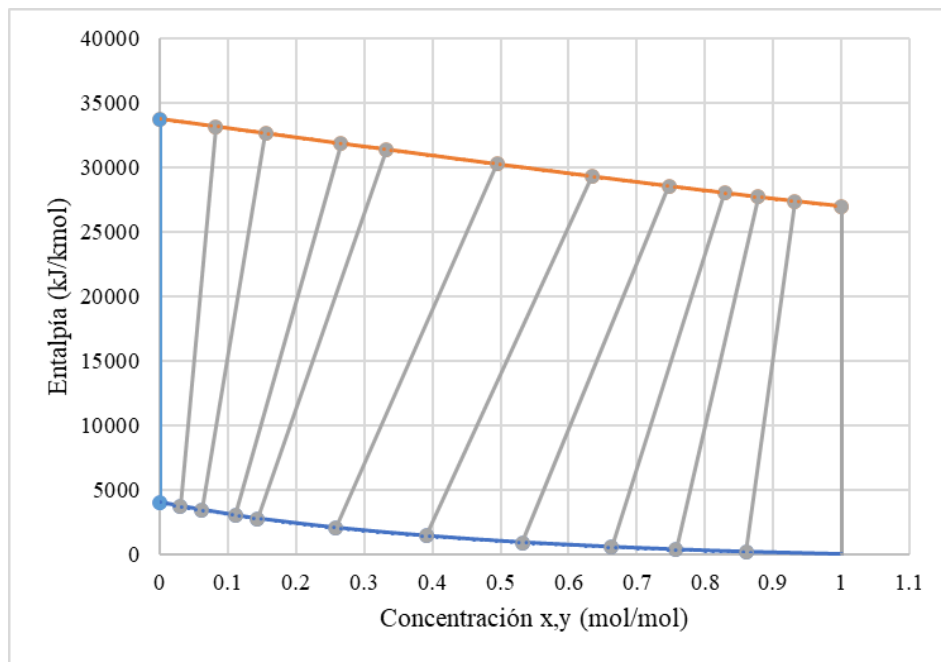
(Treybal, 1980)

Las últimas dos ecuaciones del Cuadro 3 son la capacidad calorífica y el calor latente, los cuales se requieren para el cálculo de las entalpías. Los valores constantes dentro de cada una de ellas se obtienen de forma teórica en la literatura. Las letras x, y son las concentraciones del compuesto más volátil en la fase líquida y gaseosa, respectivamente. La variable T hace referencia a la temperatura en grados centígrados que se tiene en ese punto del equilibrio, mientras que T_o es

la temperatura de referencia del sistema. Usualmente es igual a 0°C o la temperatura de los destilados. La variable T_r es la relación entre la temperatura en Kelvin de ese punto del equilibrio contra la temperatura crítica del componente.

Los datos de equilibrio a una presión constante son la temperatura y la composición del líquido y gas, es decir que para cada valor de temperatura, y que el gas y el líquido están en equilibrio. Por lo tanto, también se hace una línea de unión entre la entalpía del gas y del líquido que tienen la misma temperatura. En la Figura 6, la línea superior representa la entalpía del gas contra la composición y , mientras que la inferior es la entalpía del líquido contra la composición x . Las líneas grises representan las líneas de unión.

Figura 6. Curvas de entalpía HL y HG, con sus líneas de unión, del sistema disulfuro de carbono y tetracloruro de carbono.



c. Enriquecimiento

La sección de enriquecimiento es la parte superior de la torre, a partir del plato de alimentación, y es donde se encuentra la mayor composición del componente volátil. Dentro de esta sección, se recibe el reflujo del condensador para que pase nuevamente por la torre. Usualmente se considera un condensador total en el que la composición del reflujo es la misma que la del destilado que sale del sistema.

La determinación de la línea de operación de enriquecimiento se realiza por medio de líneas rectas arbitrarias que se despliegan desde punto ΔD hasta la curva de entalpía líquida, como se muestra en la Figura 7. El punto ΔD es una condición ficticia dentro del diagrama con coordenadas x_D y Q' , siendo el último un valor intermedio para determinar la carga del condensador.

Las líneas arbitrarias desde el punto ΔD interceptan a las curvas de entalpía líquida y entalpía gaseosa, y la coordenada abscisa de esos puntos de intersección son las coordenadas de los puntos de operación de enriquecimiento. En otras palabras, el intercepto entre la línea arbitraria y la curva de entalpía líquida provee la coordenada x del punto de operación, y el intercepto de esa misma línea arbitraria y la curva de entalpía gaseosa da la coordenada y del punto de operación. Por lo tanto, cada línea que tiene como origen ΔD determina un punto en la curva de operación de enriquecimiento.

La definición de estas líneas arbitrarias termina con una última línea que pasa por ΔD y el punto F, el cual tiene coordenadas x_F y H_F . Esto se hace para determinar la ubicación del plato de alimentación y a partir de este inicia la sección de agotamiento.

d. Agotamiento

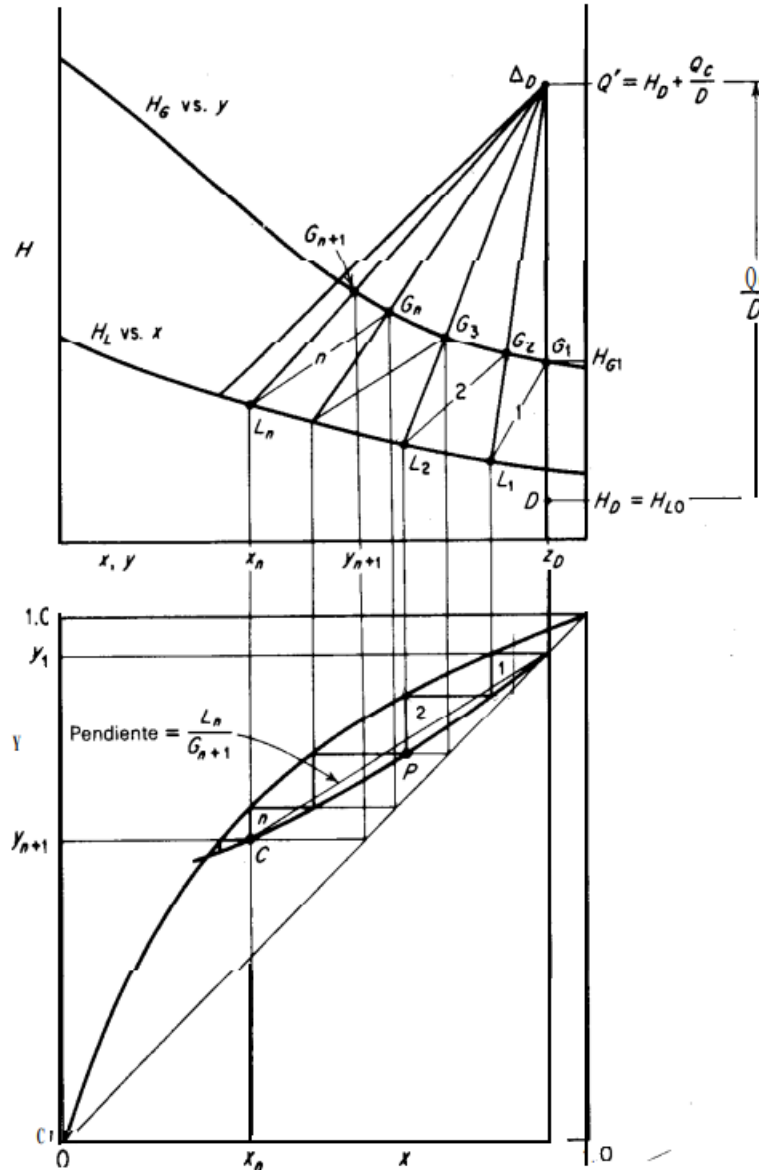
La sección de agotamiento es la parte inferior de la torre, a partir del plato de alimentación, y es donde se encuentra la mayor composición del componente menos volátil. Dentro de esta sección, entra el flujo del gas evaporado del rehervidor como fuente de energía para favorecer la evaporación del componente más volátil.

La determinación de la línea de operación de agotamiento se realiza por medio de líneas rectas arbitrarias que tienen como origen el punto ΔW hasta la entalpía de la fase gaseosa, como se muestra en la Figura 8. El punto ΔW es una condición ficticia que tiene como coordenadas x_W y Q'' , el cual es un valor intermedio para la determinación de la carga térmica del rehervidor.

Al igual que las líneas arbitrarias que se utilizan en el enriquecimiento, las líneas que tienen origen en ΔW pasan por las curvas de entalpía líquida y gaseosa. De la misma forma, una misma línea provee las coordenadas abscisas y ordenadas de los puntos de la curva de operación de agotamiento.

La definición de estas líneas arbitrarias termina con una última línea que pasa por ΔW y el punto F, el cual tiene coordenadas x_F y H_F . Esto se realiza para conectar la curva de enriquecimiento con la de agotamiento y obtener la curva de operación completa.

Figura 7. Líneas arbitrarias de ΔD y determinación de la curva de operación de enriquecimiento.

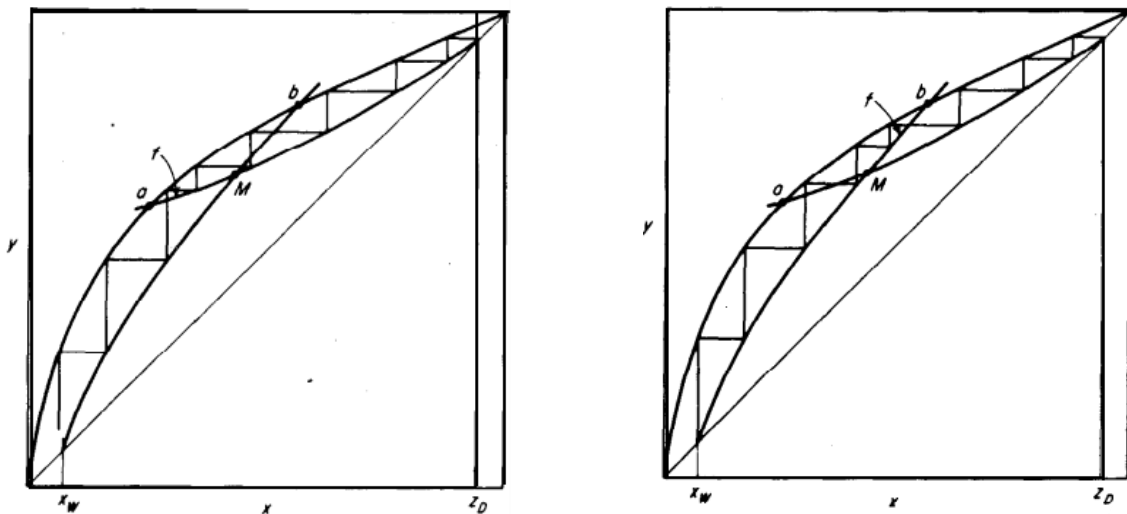


(Treybal, 1980)

El trazado de los platos se inicia en el punto correspondiente con la concentración x_D , que es la del destilado. Después, se dibuja una línea horizontal hasta la curva de equilibrio y se desplazan verticalmente hacia la curva de operación. Este proceso se repite hasta que el par de línea horizontal y vertical pasen el valor de x_w , que es el correspondiente a la concentración de las colas o residuo. Cabe mencionar que este último plato corresponde al del rehervidor.

Es importante que el plato de alimentación sea el correcto, ya que si se coloca en un plato antes, siguiendo la línea de enriquecimiento, o un plato después, de acuerdo a la línea de agotamiento, puede provocar un adelgazamiento. Este consiste en que la curva de operación se acerque al equilibrio, ocasionando que el trazado de los platos sea más pequeño y propenso a determinar más platos de los necesarios o de los que tiene un equipo fijo.

Figura 10. Adelgazamiento al colocar la alimentación un plato después (izquierda) y antes (derecha).



(Treybal, 1980)

f. Reflujo mínimo

El valor de reflujo, R , dentro de una torre es la relación entre el flujo que entra nuevamente en la parte superior de la torre y el que sale como destilado del sistema. El valor de R es completamente arbitrario, ya que su determinación depende de los costos de operación y costos fijos de la torre de destilación. El valor máximo que puede tener R es igual a infinito, ya que en este

caso el trazado de platos de la torre es con respecto a la línea diagonal y da como resultado el número mínimo posible de platos. Esto sugiere una reducción de costos fijos, pero un alto costo operacional. El valor mínimo que puede tener la torre es definido por equilibrio de la mezcla, y representa la relación máxima que requieren platos infinitos para las condiciones del sistema (Treybal, 1980).

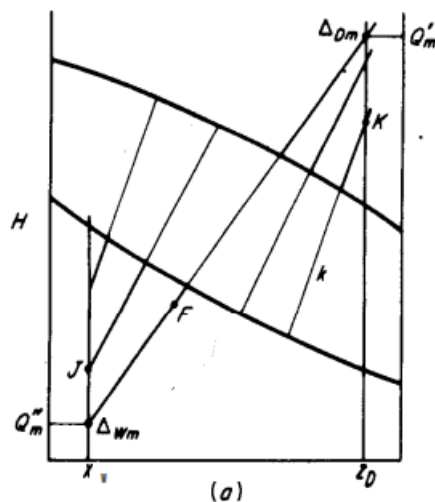
Ecuación 15. Determinación de la relación de reflujo R (Treybal, 1980).

$$R_n = \frac{Q'_n - H_{G1}}{H_{G1} - H_{L0}}$$

Donde el subíndice n hace referencia a que la ecuación puede usarse para obtener el mínimo o el real. H_{G1} es la entalpía de la fase gaseosa que sale del primer plato, con referencia a su composición y_1 , y H_{L0} la entalpía del líquido que entra a la torre, con referencia a su composición x_D , si se trata de un condensador total.

La determinación del R, ya sea el mínimo o real, se rige por la Ecuación 8. Si el sistema es una mezcla regular, el valor de ΔD_{\min} es definido por una línea de unión que pasa por el punto F y que intercepta con el valor de x_D , como se muestra en la Figura 10. La coordenada ordenada del punto ΔD_{\min} es Q'_{\min} y así obtener R_{\min} . En la práctica, se decide por un factor que multiplique el reflujo mínimo y utilizar ese reflujo como el reflujo real. Usualmente los equipos se diseñan para operar entre 1.1 y 1.5 veces el reflujo mínimo (Diquima, s.f.). Se puede despejar el valor de Q' de la ecuación 8 para obtener las nuevas coordenadas del punto ΔD y continuar con la construcción de la curva de operación.

Figura 11. Determinación de puntos mínimos de la línea F, que pasa por F, ΔD_{\min} y ΔW_{\min}

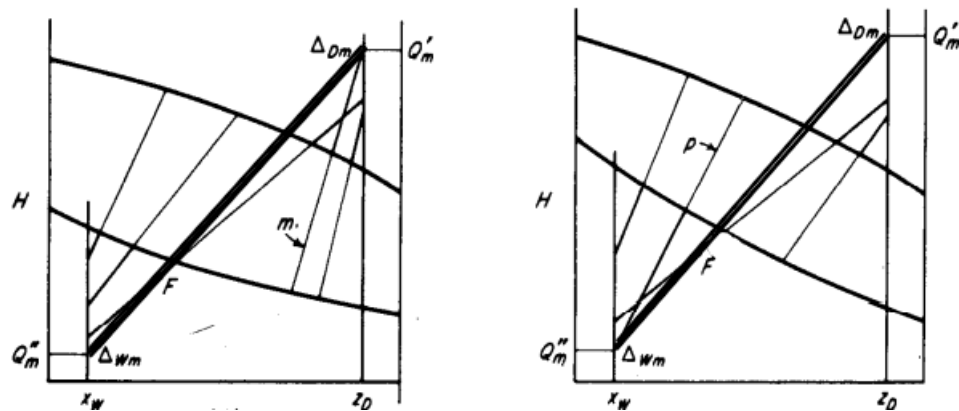


(Treybal, 1980)

El procedimiento es diferente si se tiene una mezcla con desviación positiva o negativa. De igual forma, se extiende una línea de unión que pasa por F hasta los valores de x_D y x_W para obtener la ubicación del punto ΔD_{\min} y ΔW_{\min} . Pero el valor de Q'_{\min} y Q''_{\min} , correspondientes no son los correctos para el sistema.

En sistemas con desviación positiva, se deben extender el resto de las líneas de unión del equilibrio, que se encuentran del lado derecho de la línea F, hasta la vertical correspondiente al valor de x_D . La línea de unión cuyo intercepto sea mayor en su coordenada ordenada será la ubicación del verdadero punto ΔD_{\min} . Con sistemas con desviación negativa, se deben extender el resto de las líneas de unión del equilibrio, que se encuentra del lado izquierdo de la línea F, hasta la vertical correspondiente al valor de x_W . Esto se representa de mejor manera en la Figura 11, donde las líneas más gruesas determinan el verdadero punto mínimo del destilado o del residuo. En el sistema con desviación positiva, la línea m define el valor mínimo de ΔD_{\min} , mientras que la línea p define el valor mínimo de ΔW_{\min} para un sistema con desviación negativa.

Figura 12. Determinación de ΔD_{\min} en sistemas con desviación positiva (izquierda) y determinación de ΔD_{\min} en sistemas con desviación negativa (derecha).



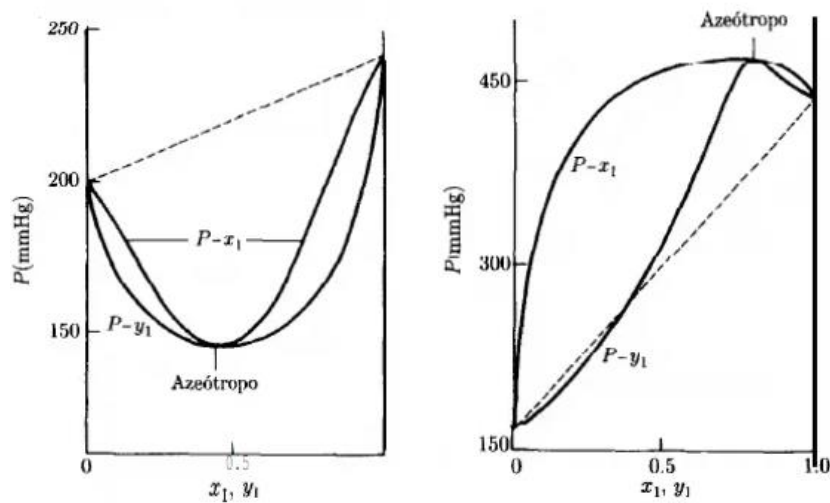
(Treybal, 1980)

4. Azeótropo

Un azeótropo es la condición en que la fase líquida y la fase gaseosa de dos o más componentes tienen la misma composición y no se pueden separar. Esto ocurre cuando las presiones de vapor de los dos o más componentes son parecidas entre sí (Clark, 2005). Pueden ser de dos

tipos: azeótropo de ebullición máxima y azeótropo de ebullición mínima. El primero se refiere a que el punto del azeótropo se desarrolla a una temperatura más grande que la temperatura de ebullición de los componentes de la mezcla, mientras que el de ebullición mínima se refiere a que la temperatura del azeótropo es menor a la temperatura de ebullición de los componentes. El sistema Etanol-Agua pertenece a este último.

Figura 13. Ejemplos de azeótropos. (Izquierda) Ebullición mínima de Cloroformo-Tetrahidrofurano y (Derecha) Etanol-Tolueno.



(Smith, *et al.*, 2007)

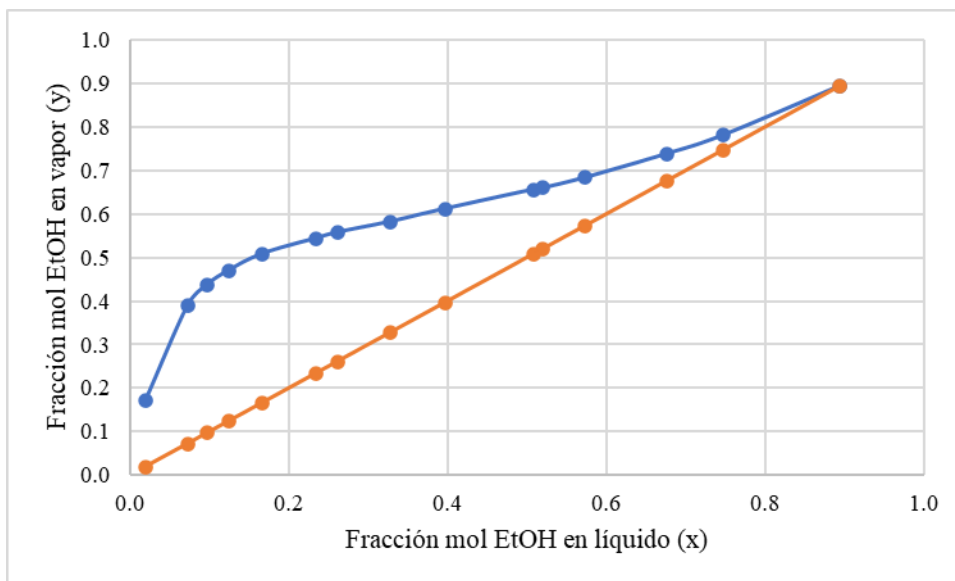
Para poder eliminar un azeótropo, se debe aumentar o disminuir la presión del sistema, ya que el punto de ebullición cambia con la presión. En un sistema de etanol-agua, el azeótropo se encuentra a 78.2°C y 89.4% mol/mol de etanol a 1 atm. Este fenómeno desaparece si se trabaja a presiones menores a 70 mmHg, aproximadamente 0.1 atm (Treybal, 1980).

Cuadro 4. Datos de equilibrio de temperatura y fracción molar en la fase líquida y gaseosa del sistema Etanol-Agua.

T (°C)	Fracción mol de EtOH	
	Líquido (x)	Vapor (y)
95.50	0.0190	0.1700
89.00	0.0721	0.3891
86.70	0.0966	0.4375
85.30	0.1238	0.4704
84.10	0.1661	0.5089
82.70	0.2337	0.5445
82.30	0.2608	0.5580
81.50	0.3273	0.5826
80.70	0.3965	0.6122
79.80	0.5079	0.6564
79.70	0.5198	0.6599
79.30	0.5732	0.6841
78.74	0.6763	0.7385
78.41	0.7472	0.7815
78.15	0.8943	0.8943

(Perry & Green, 2007)

Figura 14. Equilibrio del sistema Etanol-Agua en fracciones molares de líquido y vapor.



B. Índice de refracción

El índice de refracción es la relación entre la velocidad de la luz en el aire y en la sustancia que se está analizando. Su valor adimensional puede obtenerse con gran precisión hasta con 5 cifras significativas (Pasto & Johnson, 2003). Su valor depende de la temperatura y de la longitud de onda de la luz. Los equipos que se utilizan son los refractómetros, los cuales consisten de una fuente luminosa y prismas, mientras que los equipos nuevos y automáticos incluyen un sistema que controla la temperatura de la muestra.

El índice de refracción es una medición indirecta de la concentración de las soluciones, por lo que se emplea para determinar grados brix en azúcar, densidad de una solución, porcentaje de soluto, entre otros. Con respecto a las soluciones de etanol y agua, el índice de refracción es una medida que ayuda a determinar el porcentaje de etanol en la solución.

La determinación de propiedades de las soluciones de etanol-agua ha sido de gran interés para diferentes industrias, especial la alimenticia en la sección de licores. Por lo tanto, se han desarrollado métodos y ecuaciones para predecir la concentración de soluciones binarias a partir del índice de refracción. Uno de ellos es el de Lorentz-Lorentz, el cual se muestra en la Ecuación No. 8. Este teorema relaciona el índice de refracción de la muestra, n_L , y las de los compuestos puros, n_{D1} y n_{D2} , junto con las fracciones volumétricas de los compuestos, Φ_1 y Φ_2 (Herráez & Belda, 2006). También existe la ecuación de Gladstone-Dale, Ecuación No. 9, la cuál relaciona el índice de refracción de la mezcla y su densidad, n_G y ρ , con los índices de refracción, densidad y fracción másica de los compuestos puros, n_D , ρ y ω , respectivamente (Herráez & Belda, 2006).

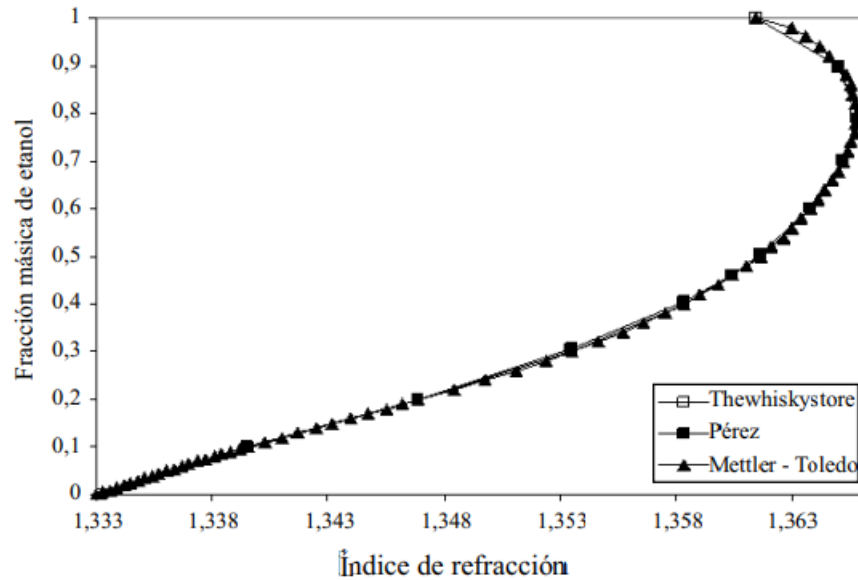
Ecuación 16. Ecuación de Lorentz-Lorentz de un sistema binario (Herráez & Belda, 2006).

$$\frac{n_L^2 - 1}{n_L^2 + 2} = \Phi_1 \frac{n_{D1}^2 - 1}{n_{D1}^2 + 2} + \Phi_2 \frac{n_{D2}^2 - 1}{n_{D2}^2 + 2}$$

Ecuación 17. Ecuación de Gladstone-Dale de un sistema binario (Herráez & Belda, 2006).

$$\frac{n_G - 1}{\rho} = w_1 \left(\frac{n_{D1} - 1}{\rho_1} \right) + w_2 \left(\frac{n_{D2} - 1}{\rho_2} \right)$$

Figura 15. Relación entre la fracción másica de etanol en una solución y el índice de refracción.



(Pérez, *et al.*, 2009)

C. Determinación de equilibrio vapor-líquido

El equilibrio es un estado de condición estática donde, conforme pasa el tiempo, no ocurre un cambio en las propiedades macroscópicas de un sistema. En las condiciones de presión y temperaturas correctas, un sistema de dos más componentes puede estar en equilibrio entre dos o más fases de estado. Por lo tanto, el equilibrio vapor-líquido se conoce como “el estado de coexistencia de las fases vapor y líquido” (Smith, *et al.*, 2007).

Existen métodos para la determinación de concentraciones en equilibrios vapor-líquido de un sistema binario. Uno de ellos es por medio de la Ley de Raoult, la cual supone que la fase de vapor es un gas ideal y que la fase líquida es una solución ideal. Si se cumplen ambas suposiciones, se pueden determinar los puntos de rocío y de burbuja por medio de las presiones, temperaturas y concentraciones en la fase vapor y líquida (Smith, *et al.*, 2007).

La ley de Henry es aplicable cuando la presión crítica es menor a la de operación, ya que utiliza una constante para corregir la presión parcial del sistema y suponer que la fase vapor es un gas ideal. La constante se conoce como constante de Henry y depende del gas que esta disuelto en agua (Smith, *et al.*, 2007).

Para presiones bajas a moderadas, se realiza una modificación a la Ley de Raoult por medio del coeficiente de actividad, γ , el modifica la presión parcial y toma en cuenta las desviaciones de la idealidad de la fase líquida (Smith, *et al.*, 2007). Un ejemplo de fase líquidas no ideales son aquellas cuyo equilibrio vapor-líquido muestran la presencia de un azeótropo. El coeficiente de actividad relaciona la fugacidad real y la concentración de una solución. Por lo tanto, es importante determinar el coeficiente de actividad específico para el sistema para realizar los ajustes a la ecuación de la Ley de Raoult. Una de las metodologías es la de UNIFAC, la cual relaciona el coeficiente de actividad a partir de “las contribuciones de los diferentes grupos que constituyen las moléculas de una solución” (Smith, *et al.*, 2007), y utiliza las ecuaciones del Cuadro 5. Es un método complejo y extenso que requiere de características específicas de los componentes del sistema como volumen relativo, R_k , área superficial relativa, Q_k , parámetros de interacción, a_{mk} , entre otros, que se pueden obtener de la literatura.

D. Transferencia de calor

1. Conducción

La transferencia de calor por conducción consiste en la proporción que existe entre el flujo de calor y el gradiente de temperatura entre dos cuerpos que están en contacto. Este tipo de transferencia de calor depende coeficiente de la conductividad térmica, k , de las sustancias, y sus unidades son $W/m \cdot K$. El coeficiente k puede ser independiente o dependiente de la temperatura y del material según sea el rango de temperatura en el que se trabaje. Para cuerpos cilíndricos, se puede utilizar la Ecuación 22, en el que el q/A es el flujo de calor sobre el área superficial del objeto, L es la dimensión de longitud del objeto y r es el radio del cilindro.

Ecuación 30. Flujo de calor por conducción en un cilindro (McCabe, Smith & Harriott, 2007).

$$\frac{q}{A} = \frac{q}{2\pi r L} = -k \frac{dT}{dr}$$

Cuadro 5. Ecuaciones involucradas en el método de UNIFAC.

Objeto	Ecuación	No.
Logaritmo natural de γ_i	$\ln \gamma_i = \ln \gamma_i^C + \ln \gamma_i^R$	(18)
Logaritmo natural de γ^C	$\ln \gamma_i^C = 1 - J_i + \ln J_i - 5q_i * \left(1 - \frac{J_i}{L_i} + \ln \frac{J_i}{L_i}\right)$	(19)
Logaritmo natural de γ^R	$\ln \gamma_i^R = q_i * \left[1 - \sum_k \left(\theta_k \frac{\beta_{ik}}{s_k} - e_{ki} \ln \frac{\beta_{ik}}{s_k}\right)\right]$	(20)
Índice ficticio J_i	$J_i = \frac{r_i}{\sum_j r_j x_j}$	(21)
Índice ficticio L_i	$L_i = \frac{q_i}{\sum_j q_j x_j}$	(22)
Índice ficticio r_i	$r_i = \sum_k v_k^{(i)} R_k$	(23)
Índice ficticio q_i	$q_i = \sum_k v_k^{(i)} Q_k$	(24)
Índice ficticio e_{ki}	$e_{ki} = \frac{v_k^{(i)} Q_k}{q_i}$	(25)
Índice ficticio β_{ik}	$\beta_{ik} = \sum_m e_{mi} \tau_{mk}$	(26)
Índice ficticio θ_k	$\theta_k = \frac{\sum_i x_i q_i e_{ki}}{\sum_j x_j q_j}$	(27)
Índice ficticio s_k	$s_k = \sum_m \theta_m \tau_{mk}$	(28)
Índice ficticio τ_{mk}	$\tau_{mk} = \exp \frac{-a_{mk}}{T}$	(29)

(Smith, *et al*, 2007)

2. Radiación

La radiación es una forma de transferencia de calor que consiste en la emisión de energía que tienen diferentes cuerpos a través del espacio y que aumenta la temperatura de otros cuerpos que absorben esa energía. La energía neta o ganada por medio de radiación es la diferencia entre la energía emitida y absorbida por el cuerpo. Todos los cuerpos pueden emitir y absorber energía en forma de radiación, y su proporción depende del material. El coeficiente de emisividad, ε , es un valor entre 0 y 1.0, y es la capacidad de un cuerpo de emitir energía: mientras mayor sea el

coeficiente de emisividad, menos energía emitirá el objeto, sino que la absorberá. Un cuerpo negro es un material cuya emisividad es igual a 1.0, lo cual significa que toda la energía en forma de radiación que cae en el objeto se absorbe.

Cuadro 6. Ecuaciones de transferencia de calor por medio de conducción y radiación.

Ecuación	Fórmula	Variables	No.
Calor por conducción	$Q_x = \frac{k\bar{A}_L(T_i - T_o)}{r_o - r_i}$	<p>Q_x = flujo de calor por conducción k= coeficiente de conductividad térmica T_i= Temperatura interna T_o= Temperatura externa r_o= radio externo r_i= radio interno</p>	(31)
Área promedio	$\bar{A}_L = \frac{2\pi L(r_o - r_i)}{\ln\left(\frac{r_o}{r_i}\right)}$	<p>AL= Área promedio L= largo r_o= radio externo r_i= radio interno</p>	(32)
Calor por radiación	$Q_R = \delta\varepsilon A(T^4 - T_c^4)$	<p>QR= flujo de calor por radiación δ= constante de Boltzmann ε= coeficiente de emisividad T= temperatura de superficie caliente T_c= temperatura de alrededores</p>	(33)

(McCabe, Smith & Harriott, 2007)

E. Análisis estadístico con Prueba F

La prueba F es un análisis de varianza que considera la igualdad de la media de dos o más grupos para aceptar o negar las hipótesis. Se basa en la relación que existe entre la variación que existe entre los grupos y en un grupo en sí (Anderson, *et.al*, 2016). La Prueba F se utiliza como un indicador de precisión y exactitud entre muestras. Por lo tanto, la prueba F se utiliza para determinar si las varianzas entre dos o más muestras son diferentes. La prueba F toma los valores y determina un valor F, el cual debe ser comparado con el valor F teórico. Si el valor obtenido es menor al valor crítico, se puede concluir que los datos no presentan diferencia significativa entre sí. Microsoft Excel provee diferentes análisis de prueba F a partir de un solo factor, dos muestras con un solo factor o dos muestras con varios factores (Anderson, *et.al*, 2016).

F. Simuladores

1. Importancia de un simulador

Las técnicas de simulación se utilizan para analizar procesos actuales y futuros para realizar mejoras o anticipar soluciones. Se utilizan para optimizar recursos, reducir costos fijos o variables, identificar errores o restricciones en el proceso, evaluación y análisis de puntos críticos, y determinación de condiciones extremas (Guasch, *et al.*, 2003).

Un simulador es una herramienta que utiliza modelos matemáticos para evaluar de forma rápida un proceso y se realiza por medio de un programa de computadora debido a la cantidad de variables, cálculos intermedios, y la no linealidad (León, 2013). En ingeniería Química, el uso de simuladores ha sido una técnica de gran apoyo para la solución de problemas en las diferentes operaciones unitarias de la industria. (León, 2013). Cabe mencionar que el uso de simulaciones permite minimizar la investigación experimental, más no eliminarla, ya que la experimentación valida los modelos matemáticos utilizados en el simulador.

2. Tipos de simuladores

Existen diferentes enfoques para los simuladores, ya que unos analizan datos históricos para proveer un pronóstico, mientras que otros utilizan las condiciones de un sistema para devolver un resultado. A continuación, se presentan algunos tipos de simuladores.

- Simuladores de eventos discretos: la secuencia de eventos discretos, acciones o resultados que tienen un número entero como resultado, ocurren en diferentes intervalos de tiempo.
- Simuladores de eventos continuos: existen resultados para todos los puntos de una simulación, sin intervalos.
- Simulador combinado: el sistema tiene variables discretas y variables continuas, por los resultados serán dependientes de ambas. Además, los cambios en los dos tipos de variables pueden afectar el valor de otra.
- Simuladores determinísticos: el resultado es el esperado ya que no utilizan valores aleatorios.

- Simuladores estocásticos: el comportamiento del sistema depende de un valor aleatorio, por lo que el resultado son probabilidades o distribución de probabilidades.
- Simuladores estáticos y dinámicos: en la simulación estáticas, el tiempo no se considera una variable importante, mientras que en la dinámica sí.
- Simulador orientado hacia procesos: se refiere a un simulador que determina el orden lógico de los procesos, por lo que su resultado es un diagrama de flujo de procesos.

(MKT, 2021) (Zapata, s.f.)

3. Partes de un simulador

a. Características

Como se mencionó anteriormente, un simulador es un programa que permite representar operaciones de equipos de forma digital para ahorrar energía y reactivos, y poder visualizar los cambios que tienen las condiciones de producción en cuanto a los productos. Por lo tanto, el simulador debe de tener las siguientes características:

- Amigable al usuario: un simulador debe ser un puente de comunicación entre el operador y el equipo, por lo que debe estar en un lenguaje comprensible y lo suficientemente técnico para disminuir los errores del usuario al colocar los datos iniciales y condiciones del proceso. Es preferible de que el usuario opte por un simulador cuyo idioma pueda entender y comprender.
- Instrucciones claras: el simulador debe guiar al usuario desde el momento en que inicia el programa hasta que obtiene los resultados. La operación del simulador debe ser auxiliada por un manual que permita al usuario saber cuál es el siguiente paso en el proceso. De igual manera, el mismo simulador debe contar con instrucciones o proveer direcciones claras sobre los valores iniciales, donde se deben colocar, las unidades que se están utilizando entre otros.
- Sistema de unidades congruente: es muy importante que el simulador mantenga el mismo sistema de unidades desde un principio y recordar al usuario sobre estos.
- Límites: para que el simulador tenga resultados válidos, se deben de especificar los valores límites del sistema. Los límites incluyen los respectivos a valores iniciales, condiciones de operación, eficiencia de producción, entre otros. La presentación de estos límites desde un inicio puede ahorrarle tiempo y dinero al usuario.

b. Instrucciones

Un simulador debe de tener instrucciones lo más claras posibles dentro de su interfaz para que el usuario pueda navegar por cada opción de forma intuitiva. También puede tener un material extra, como un manual, que indique los pasos de operación en caso de que el usuario necesite ayuda.

c. Mensajes de error

Los mensajes de error permiten de que el simulador pueda trabajar en los límites permisibles y que el usuario pueda obtener resultados válidos a su proceso. También, ayudan al usuario a estar seguro de los datos o valores que está ingresando al simulador.

4. Variables

En una torre de destilación, las variables son las composiciones y el flujo másico de los flujos de alimentación, destilados y residuos. A partir de los datos de la alimentación, se puede determinar más información sobre los requerimientos térmicos del rehedidor y del condensador.

Se pueden realizar ciertas suposiciones para que reducir los cálculos:

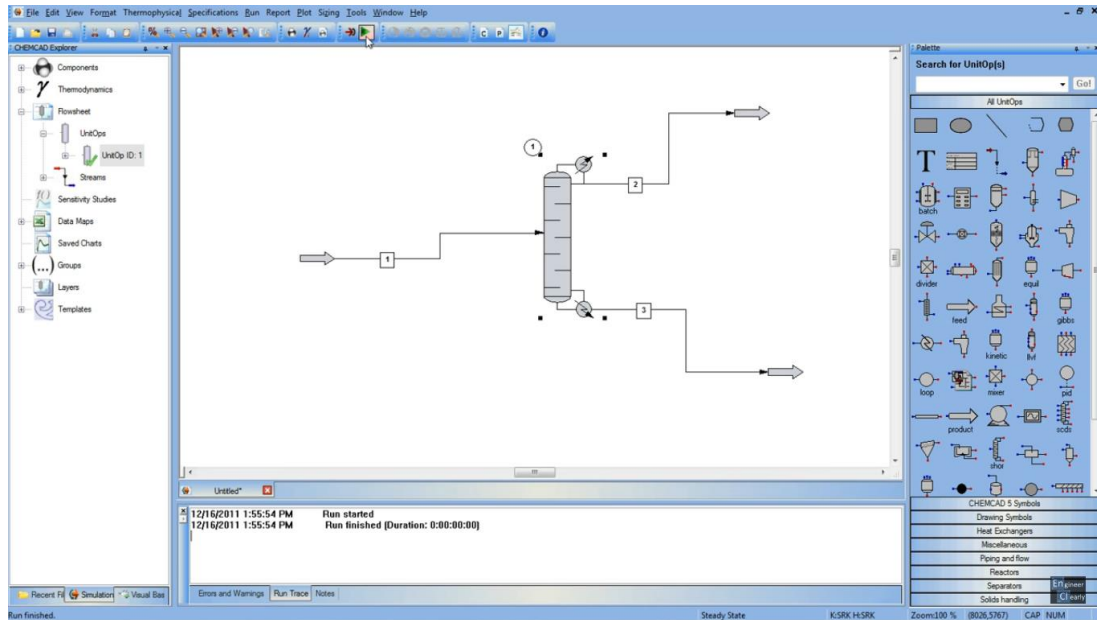
- La alimentación entra como un líquido saturado. Existe casos en los que el flujo de alimentación es una mezcla de vapor y líquido, pero que esta requiere de separarse antes de entrar a la columna, lo cual supone un costo extra en la operación del equipo. La fase líquida se agregaría en la parte superior del plato y el vapor se inyectaría en la inferior del plato para entrar en contacto con el líquido (García, *et al.*, 2013).
- No hay pérdidas de calor. El aislamiento de la torre de destilación permite que la operación sea adiabática.
- Uso de un condensador total para que la composición del flujo de reflujo tenga la misma concentración de destilado.
- La fase líquida y gaseosa que salen de un plato están en equilibrio térmico.
- No hay acumulación de vapor en el sistema.

(Treybal, 1980) (Bedolla, *et al.*, 2016)

5. Programas existentes

- ChemCad: es un programa descargable que permite dimensionar una torre de destilación y hacer un diagrama de este.

Figura 16. Interfaz de usuario de ChemCad.



- ChemSep: es una versión gratuita de ChemCad y puede simular procesos de destilación, absorción y extracción. Por ser gratuito, tiene un límite de 150 platos y 10 componentes. La interfaz permite seleccionar los componentes, el tipo de proceso, las propiedades del sistema y obtener las composiciones de cada uno de los platos.
- Aspen Plus: es un programa utilizado para diversas operaciones dentro de la industria y ofrece herramientas como elaboración de un diagrama con diversidad de equipos, estimación de operaciones y análisis de sensibilidad.

Figura 17. Interfaz de usuario de ChemSep.

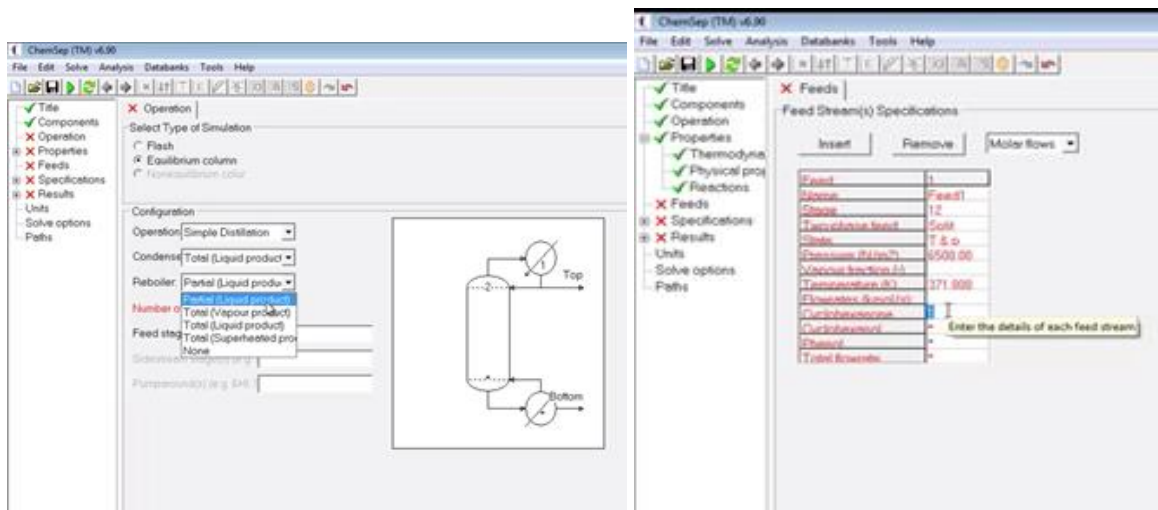
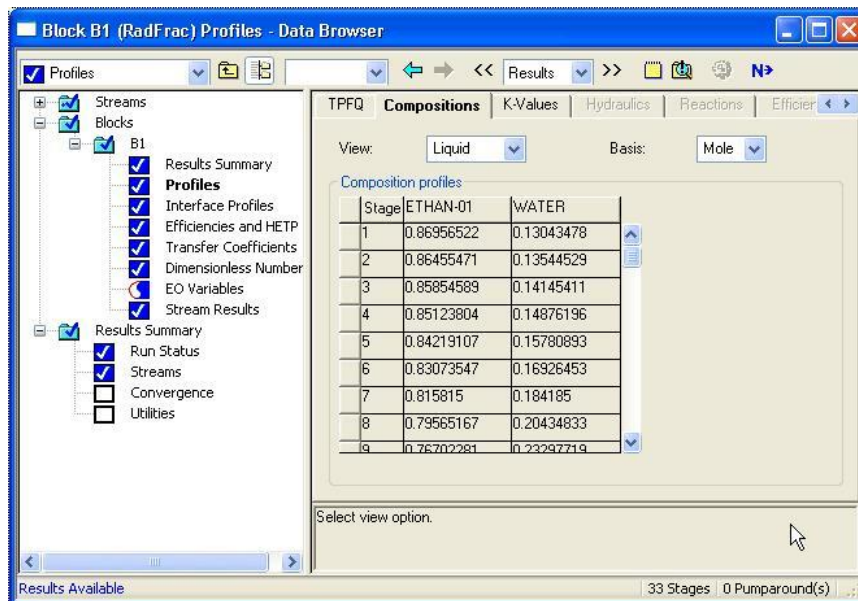


Figura 18. Interfaz de usuario de Aspen Plus.



(MSU, s.f.)

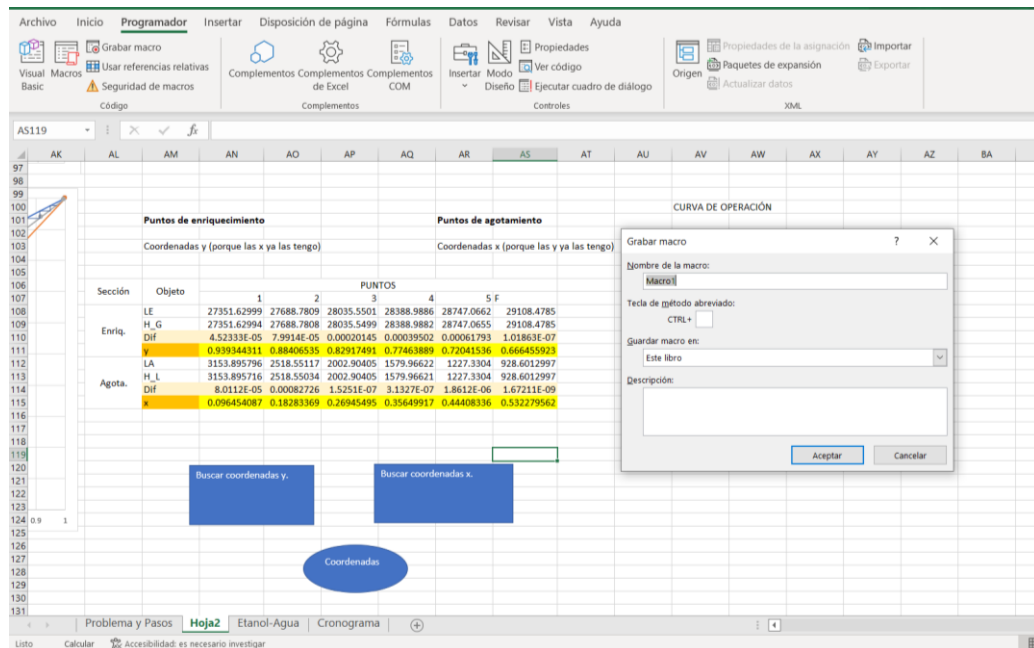
6. Uso de Microsoft Excel con macros

Microsoft Excel es un software de hojas de cálculo, que posee herramientas de análisis avanzado y visualización de datos. Dentro del mismo, se pueden realizar diferentes operaciones matemáticas, gráficas de datos y análisis estadísticos si es necesario. El programa de Excel tiene una sección conocida como Visual Basic Application (VBA), la cual desarrolla macros (Acosta, 2010). Es importante activar el complemento de Excel denominado como “Programador” para crear y utilizar macros.

Las Macros de Excel consisten en una serie de instrucciones que se ejecutan de manera secuencial para realizar una determinada acción o cálculo dentro de la hoja de Microsoft Excel. Existen dos formas de crear una macro.

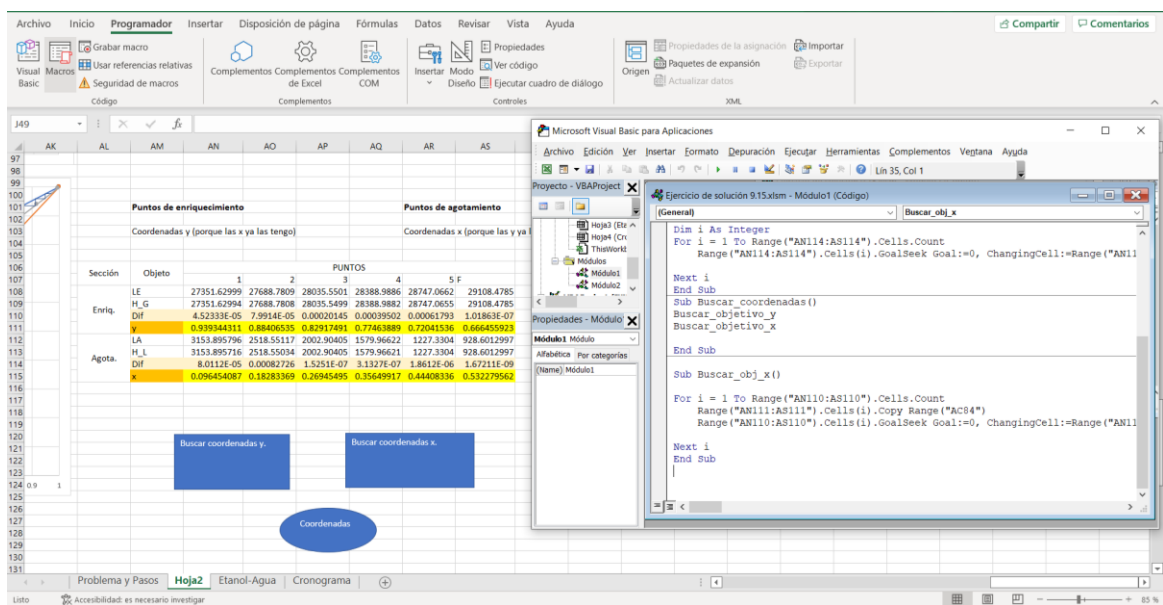
- Grabar: en este procedimiento, el usuario graba acciones que se realizan en la hoja de cálculo, ya sea por medio del cursor o del teclado, y se convierte en un código. Se debe dar al botón de grabación para el inicio y nuevamente para terminar la grabación.

Figura 19. Grabación de macros.



- Escribir código: en este método, se abre una hoja de código de VBA para que el usuario pueda escribir las instrucciones de la macro en forma de código y detallada. Dentro de VBA, el usuario puede correr cada una de las líneas para determinar si la macro esta funcionando correctamente. También indica sí existe algún error en el código. El usuario puede escribir el código de una acción o conjunto de acciones que sean propias de su hoja de cálculo, y estas se pueden utilizar en otras hojas de cálculo.

Figura 20. Código de una macro en Microsoft Excel vía VBA.



Las ventajas de utilizar macros son las siguientes:

- Reducción de tasa de errores: se evitan las operaciones manuales, por lo que disminuye el error debido a acciones repetitivas de cálculo.
- Reduce el tiempo de trabajo: es fácil activar las instrucciones de la macro.
- Aumenta el uso de Excel: con VBA, se puede desarrollar nuevas funciones que antes no existían en Excel y son completamente personalizables.

(IONOS, 2019).

Las macros no solamente se pueden utilizar para realizar cálculos inmediatos, sino que también se puede utilizar para programar cuadros de texto con información, cuadros de advertencia de error interactuar con el usuario con cuadros de textos. Las instrucciones de las macros se pueden activar por medio de botones digitales o por medio de comandos del teclado (Acosta, 2010). Cabe mencionar que las hojas de cálculo que contengan macros deben de guardarse con el tipo de archivo. xslm, si no, se corre el riesgo de que el programa o macro no se guarde (IONOS, 2019).

V. METODOLOGÍA

A. Curva de calibración de concentración e índice de refracción.

Cuadro 7. Materiales para el procedimiento de Curva de calibración de concentración e Índice de refracción.

Equipo	<ul style="list-style-type: none">• Refractómetro ATAGO RX-5000• Baño térmico
Cristalería	<ul style="list-style-type: none">• Probeta de 25 mL• Pipetas de 1mL, 2mL y 5 mL.• 10 Balones de 100mL o 50mL• Beaker de 10 mL.
Materiales	<ul style="list-style-type: none">• Kimwipe• Piceta de agua destilada
Reactivos	<ul style="list-style-type: none">• Etanol absoluto 99.9%• Agua destilada

1. Encender el baño térmico y establecer la temperatura de 20°C.
2. Realizar soluciones de etanol a 1%, 5%, 10%, 20%, 40%, 50%, 70%, 80%, 90% y 99% m/m.
3. Encender el refractómetro.
4. Realizar un blanco con agua destilada y establecerlo como cero en el equipo.
5. Colocar unas gotas de cada solución, empezando con la de menor concentración, en el refractómetro.
6. Esperar a que la temperatura de la muestra este alrededor de 20°C y anotar el índice de refracción.
7. Limpiar con un kimwipe.
8. Repetir los pasos 5 al 7 para obtener tres valores de una misma solución.
9. Repetir los pasos 5 al 8 para el resto de soluciones.
10. Realizar una curva que relacione la concentración v/v con el índice de refracción.
11. Al terminar, limpiar el refractómetro con agua destilada y secar con un kimwipe.
12. Apagar el refractómetro y el baño térmico.

13. Repetir el procedimiento hasta que los sets de datos cumplan con la prueba F de análisis de una sola variable.

B. Datos de equilibrio vapor-líquido experimentales.

Cuadro 8. Materiales para el procedimiento de Datos de equilibrio vapor-líquido experimentales.

Equipo	<ul style="list-style-type: none"> • Refractómetro ATAGO RX-5000 • Baño térmico • Termómetro de alcohol 0-100°C
Cristalería	<ul style="list-style-type: none"> • Probeta de 25 mL • Pipetas de 1mL, 2mL y 5 mL. • Kit de destilación (balón de tres bocas, columna, condensador).
Materiales	<ul style="list-style-type: none"> • Vaselina • Agitador magnético • Kimwipe • Piceta de agua destilada • Plancha térmica
Reactivos	<ul style="list-style-type: none"> • Etanol absoluto 99.9% • Agua destilada

1. Encender el baño térmico y establecer la temperatura de 20°C.
2. Encender el refractómetro.
3. Colocar el sistema de destilación simple.
 - a. Colocar el balón de tres bocas en un soporte universal por medio de una pinza.
 - b. Colocar la plancha térmica o placa de calentamiento debajo del balón de tres bocas a una distancia de 5 cm.
 - c. Colocar un tapón con termómetro en la boquilla de en medio del balón.
 - d. Colocar el condensador en un soporte universal y una pinza.
 - e. Colocar vaselina en la unión entre el balón y el condensador. Ajustar altura del condensador.

- f. Conectar la entrada de agua en la boquilla inferior del condensador y la salida de agua en la boquilla superior.
- g. Colocar un tapón en la tercera boquilla del balón.
- h. Encender la válvula de agua para que fluya agua dentro del condensador.
4. Colocar un agitador magnético dentro del balón.
5. Colocar la solución de 100 mL de etanol dentro del balón.
6. Ajustar la altura del bulbo del termómetro hasta que este esté sumergido en la solución.
7. Encender la plancha térmica y la agitación.
8. Esperar hasta que se observen las primeras burbujas de ebullición.
9. Registrar la temperatura.
10. Recolectar 5 ml del destilado con un beaker.
11. Tomar una muestra del líquido dentro del balón.
12. Retirar la plancha térmica para detener el calentamiento.
13. Realizar un blanco con agua destilada en el refractómetro y establecerlo como cero en el equipo.
14. Colocar una gota del destilado en el lente del refractómetro, esperar a que disminuya la temperatura, y anotar el índice de refracción.
15. Limpiar el lente con un kimwipe y hacer lo mismo con una gota del líquido contenido dentro del balón.
16. Hacer un triplicado de las concentraciones.
17. Agregar 10 mL de agua dentro del balón y colocar nuevamente la plancha térmica para continuar el calentamiento y agitación.
18. Repetir los pasos 6-17 hasta tener 10 valores de índice de refracción del destilado y de la solución dentro del balón.
19. Apagar la fuente de agua del condensador.
20. Apagar la plancha térmica.
21. Limpiar la cristalería.
22. Limpiar el refractómetro con agua destilada y secar con un kimwipe.
23. Apagar el refractómetro y el baño térmico.
24. Repetir el procedimiento hasta que los sets de datos cumplan con la prueba F del Análisis de una sola variable.

C. Preparación y operación de la Torre de Destilación.

Cuadro 9. Materiales para el procedimiento de Preparación y Operación de la Torre de Destilación

Equipo	<ul style="list-style-type: none">• Refractómetro ATAGO RX-5000• Baño térmico• Termómetro de alcohol 0-100°C• Termómetro digital de vástago• Termómetro laser• Caldera pirotubular (operación entre 80-100psi)• Torre de Enfriamiento• Torre de Destilación
Cristalería	<ul style="list-style-type: none">• Probeta plástica de 2L.• Probeta 250 mL.• 12 beakers 50 mL.• Densímetro de etanol (% v/v)
Materiales	<ul style="list-style-type: none">• 4 cubetas plásticas de 20L• Parafilm• Kimwipe• Piceta de agua destilada• Plancha térmica
Reactivos	<ul style="list-style-type: none">• Etanol absoluto 99.9%• Agua destilada

1. Colocar las condiciones de operación en el simulador y obtener le plato de alimentación.
2. Verificar que las válvulas del calderín, platos y condensador estén cerradas.
3. Verificar que la caldera y la torre de enfriamiento estén operando.
4. Verificar el nivel de líquido dentro del calderín.
 - a. Si el calderín contiene líquido:
 - i. Tomar una muestra en una probeta de 250 mL y medir la concentración utilizando un densímetro de etanol y refractómetro.
 - ii. Medir el volumen.

- iii. Ajustar cálculos de alimentación inicial con el volumen actual dentro del calderín y el volumen adicional, para tener una solución total de 60 L de etanol y agua.
 - b. Si no contiene líquido, realizar una solución de 60 L de etanol y agua.
5. Abrir la válvula de alimentación del calderín.
6. Cargar la solución y cerrar la válvula de alimentación.
7. Abrir la válvula de vapor del calderín hasta alcanzar una presión de 3 psi.
8. Monitorear la presión de vapor para mantener las temperaturas constantes.
 - a. Un cambio en la presión puede ocasionar un aumento rápido de temperatura en la torre y afectar la concentración final del destilado.
9. Monitorear la temperatura del calderín y de los platos de la Torre de Destilación.
 - a. Si no hay un cambio de temperatura, se debe liberar presión en la parte superior del condensador.
10. Cuando la temperatura del último plato sea 40°C, encender el condensador.
11. Esperar hasta que la temperatura de los platos sea constante.
12. Cuando se obtenga condensado, abrir el plato de alimentación.
13. Operar a reflujo total.
14. Después de 30 minutos, tomar muestras de aproximadamente 10 mL en beakers de 50 mL y taparlos inmediatamente con Parafilm.
15. Colocar los beakers en un baño térmico de 20°C.
16. Determinar el índice de refracción de la muestra obtenida de cada plato, iniciando con el primer plato.
17. Repetir el paso 14 para cada muestra.
18. Repetir los pasos 13 al 16 tres veces más o hasta que la diferencia entre las concentraciones de cada plato sea menor o igual a 0.01.
19. Cerrar la válvula de reflujo y la del plato de alimentación
20. Abrir la válvula azul en la parte superior y la alimentación del plato 1.
21. Esperar unos tres minutos.
22. Abrir la válvula de destilados y recolectar 250 mL.
23. Determinar la concentración con un densímetro o con el refráctometro.

- a. Si la concentración es cercana a 93% v/v, continuar recolectando el destilado hasta que la concentración bajé a 85%.
 - b. Si no, se debe de cerrar las válvulas y alimentar nuevamente al plato de alimentación (paso 12).
- 24.** Tara una cubeta y colocarla en la válvula de descarga de destilado.
 - 25.** Abrir la válvula de destilados y recolectar el producto.
 - 26.** Cerrar la válvula y pesar la cubeta con destilados.
 - 27.** Tomar una muestra de 250 mL del volumen final y medir la concentración de etanol %v/v con un densímetro de etanol y con el refractómetro.
 - 28.** Cerrar la válvula de vapor.
 - 29.** Esperar hasta el día siguiente para medir el volumen del líquido en el calderín y su concentración con el refractómetro.
 - 30.** No descargar el calderín para la siguiente práctica.

VI. RESULTADOS

Cuadro 10. Concentraciones en la fase líquida, x , y en la fase vapor, y , del sistema etanol-agua por medio de Raoult modificado y el coeficiente de actividad del método UNIFAC.

T (°C)	T (K)	x1 (molar)	Coef. Act. 1	y1
75	348.15	0.91307927	1.0071028	0.90728301
76	349.15	0.8515619	1.01914461	0.85064807
77	350.15	0.64439597	1.10373426	0.70549658
78	351.15	0.48185866	1.25448314	0.62042635
79	352.15	0.35697688	1.48924819	0.56646649
80	353.15	0.26337825	1.81861418	0.52884583
81	354.15	0.19527232	2.23198743	0.49823669
82	355.15	0.14742775	2.6887378	0.46969675
83	356.15	0.1151455	3.12748293	0.4423849
84	357.15	0.09422794	3.49485104	0.41802322
85	358.15	0.08227905	3.74264696	0.40032954
86	359.15	0.07481323	3.9135925	0.38733052
87	360.15	0.069717	4.03774994	0.37737643
88	361.15	0.06346646	4.20031918	0.36387552
89	362.15	0.05241069	4.51994817	0.33573047
90	363.15	0.03263706	5.21237827	0.26478273
91	364.15	0.00626429	6.46357671	0.08366919
92	365.15	0.00397915	7.08171655	0.06232252
93	366.15	0.02634236	5.45649204	0.23311578

Figura 21. Distribución de concentraciones en la fase líquida y vapor del sistema etanol-agua.

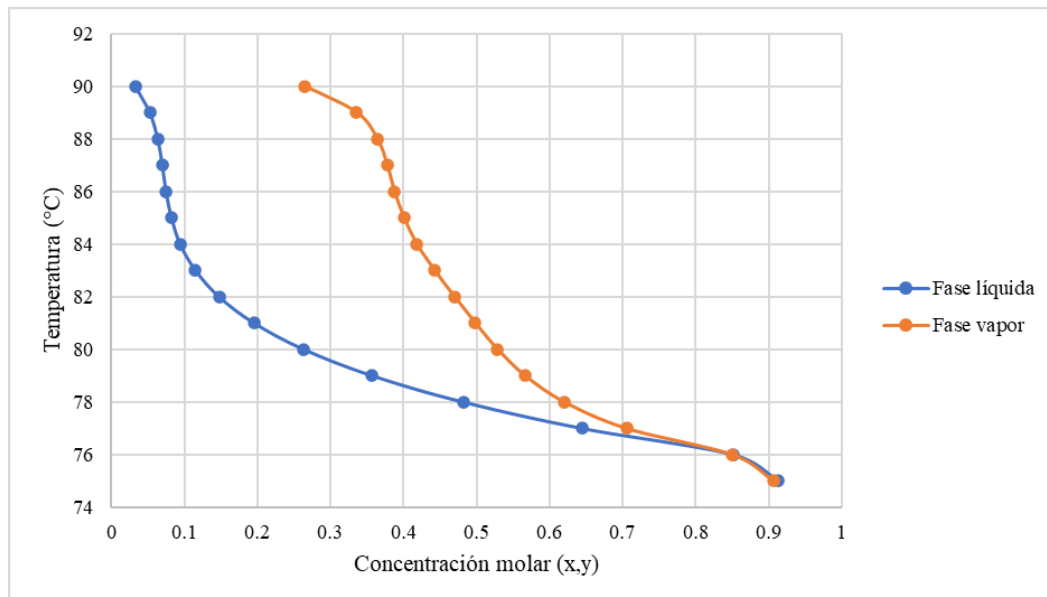
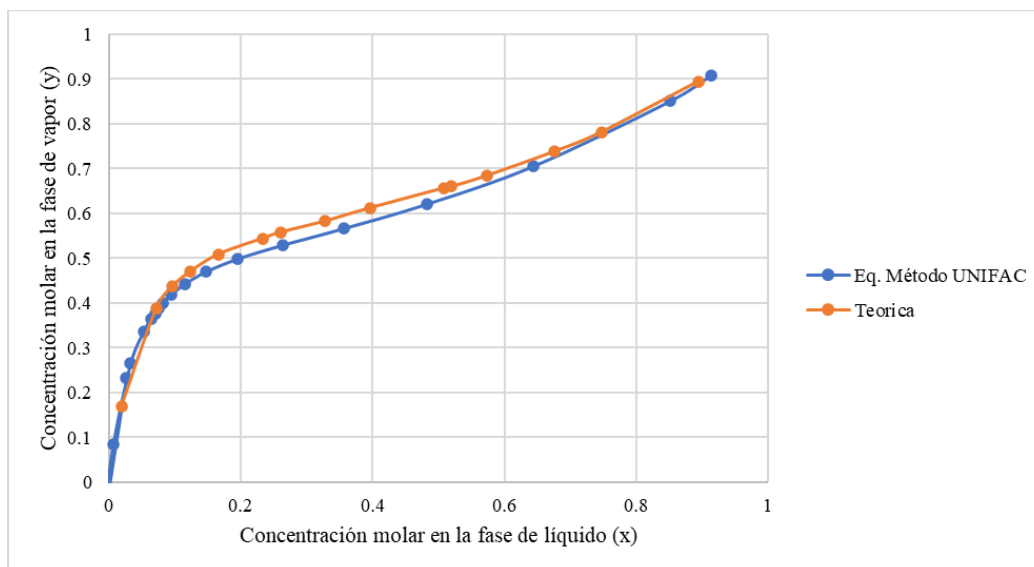


Figura 22. Comparación de equilibrio vapor-líquido de 1 atm teórica y 0.97 atm experimental.



Cuadro 11. Resultados experimentales y del simulador de diferentes corridas.

Condiciones	Corrida					
	24 junio	28 junio	19 julio	26 julio	02 agosto	22 agosto
Concentración inicial de solución de 60L (% v/v)	15%	15%	30%	25%	25%	20%
Temperatura promedio de operación (°C)	72-74	74-75	74-75	78-80	75-77	74-76
Concentración de reflujo inicial (% v/v)	88%	90%	90%	87%	89%	90%
Plato de alimentación	9	9	10	10	9	8
Concentración de destilado esperado (% v/v)	93.05%	92.96%	92.48%	89.22%	91.69%	92.48%
Concentración de colas esperada (% v/v)	2%	2.40%	2.88%	7.03%	3.81%	2.88%
Concentración de destilados obtenidos (% v/v)	93%	93%	93.1%	89.21%	92.9%	94%
Concentración de colas obtenidos (% v/v)	1.5%	1.11%	1.28%	7.58%	10%	2.3%

Cuadro 12. Análisis estadístico de los resultados obtenidos por la Torre de Destilación y del simulador.

Objeto	Corrida						Desviación estándar
	1	2	3	4	5	6	
Porcentaje de error de los destilados	0.0538%	0.0430%	0.6660%	0.0112%	1.3025%	1.6170%	0.7051%
Porcentaje de error de las colas	33.3333%	116.2162%	125.0000%	7.2559%	61.9000%	25.2174%	49.15%

VII. ANÁLISIS DE RESULTADOS

El objetivo de este trabajo de graduación fue elaborar un programa de simulación para la operación tipo batch de la Torre de Destilación del Laboratorio de Operaciones Unitarias de la Universidad del Valle de Guatemala para determinar el plato de alimentación para mezclas binarias etanol-agua.

La correcta simulación de la operación de la Torre de Destilación necesita de valores del equilibrio vapor-líquido de acuerdo con la presión atmosférica del sitio donde se realiza la experimentación. Por lo tanto, era necesario conocer las concentraciones del equilibrio vapor-líquido a la presión atmosférica del Laboratorio de Operaciones Unitarias. También era necesario un método de medición de concentraciones para utilizar el método de Ponchon y Savarit. El método que se utilizó para medir la concentración de las soluciones de etanol-agua fue el índice de refracción, n_D , por medio del refractómetro ATAGO RX-5000 del laboratorio. Esto se debe a que la concentración de las soluciones depende de la temperatura, y el refractómetro está conectado a un baño térmico, lo cual permite que todas las concentraciones se puedan comparar a la misma temperatura de 20°C y ser más exacto que otros métodos. Por lo tanto, fue necesario realizar una curva de calibración para el refractómetro utilizando diferentes soluciones conocidas de etanol-agua para así obtener su respectivo índice de refracción.

Para la curva de calibración de concentración contra índice de refracción, se prepararon 11 soluciones con las siguientes concentraciones másicas: 1%, 5%, 10%, 20%, 40%, 50%, 75%, 80%, 90%, 95% y 99%. Las soluciones se realizaron en balones aforados de 25mL y con etanol absoluto 99.9%. Se utilizó agua destilada como una solución de 0% de concentración y etanol absoluto para una solución de 99.9%. Se realizaron estas concentraciones para obtener una curva de calibración lo más completa posible y que incluyera las posibles concentraciones de carga inicial, las cuales pueden ser menores a 20% v/v; alimentación, que estarían alrededor de 80% v/v; destilados, cuyas concentraciones pueden estar entre entre 90% v/v y 95% v/v; y colas, que podrían ser menores a 10% v/v. En el Cuadro 20 de Anexos, se muestra el análisis estadístico utilizando ANOVA para un factor para las tres corridas de la curva de calibración. La prueba F se utiliza para la analizar la variación entre muestras de datos. Para el análisis de los datos obtenidos en la curva de calibración, el valor de F fue de 0.0003, mientras que el valor teórico fue de 3.26, por lo que la varianza entre los sets de datos no es significativa y se pueden considerar como confiables.

Con respecto a la curva de calibración del índice de refracción, la Figura 15 muestra la tendencia teórica del sistema etanol-agua, respaldado por datos teóricos de ecuaciones y pruebas experimentales. La Figura 23, en la sección de Anexos, muestra los valores obtenidos de forma experimental de 13 soluciones conocidas utilizando el refractómetro ATAGO RX-5000, y se puede observar que su comportamiento es similar a la teórica. Ambas tienen una pendiente positiva desde el punto inicial, que corresponde al blanco de agua destilada, hasta un valor aproximado de 0.8 de concentración molar de etanol. A partir de este punto, el índice de refracción empieza a decrecer, aunque la concentración aumenta. Este fenómeno se debe a que la mezcla de etanol y agua no es una solución ideal. Las soluciones ideales son las que las presiones de vapor de sus componentes son diferentes, mientras que las soluciones no ideales poseen desviaciones positivas y negativas, como los azeótropos. También se considera que su comportamiento se debe a los enlaces de hidrógeno que se forman en la solución. Ya que la curva de calibración tiene la misma tendencia y comportamiento que la curva teórica, se comprueba que la calibración obtenida fue la esperada y el refractómetro está operando correctamente.

Después de obtener la curva de calibración de los índices de refracción, se continuó con la determinación de los valores de equilibrio. La presión atmosférica del Laboratorio de Operaciones Unitarias es de alrededor de 0.978 atm, por lo que era necesario determinar las condiciones de equilibrio vapor-líquido a estas condiciones en lugar de utilizar los datos teóricos, los cuales fueron obtenidos bajo una presión de 1 atm. Por lo tanto, se realizaron tres destilaciones simples en el laboratorio según el procedimiento de la sección B de Metodología del presente trabajo. Se utilizó un kit de destilación como método alternativo para obtener los valores de equilibrio vapor-líquido en lugar de la torre de platos. Las razones por la que se utilizó el kit de destilación fueron porque es un equipo más pequeño en comparación a la torre de platos, por lo que utiliza menos reactivos, el calentamiento puede ser realizado por medio de una plancha térmica en lugar de una chaqueta de vapor saturado, y el tiempo de destilación es menor. La experimentación a escala laboratorio permite un ahorro de material, energía y tiempo. Como las destilaciones simples se realizaron en el Laboratorio de Operaciones Unitarias, es decir a la misma presión atmosférica, los datos del equilibrio obtenidos pueden ser utilizados para los cálculos de la Torre de Destilación. A partir de estas experimentaciones, se obtuvieron las concentraciones de la fase líquida en el punto de ebullición. Considerando de que la solución de etanol y agua no es una solución ideal, se utilizó el modelo de Raoult Modificado y el método UNIFAC para determinar el coeficiente de actividad y, por último, las concentraciones de equilibrio de la fase vapor. El coeficiente de actividad es un factor que se utiliza para modificar soluciones no ideales y que las ecuaciones de soluciones ideales

sean aplicables a ellas. En el Cuadro 10 se muestran los resultados de coeficiente de actividad del etanol en la solución y la concentración de la fase de vapor, y_1 . La Figura 21 muestra el equilibrio entre las dos fases en las temperaturas de ebullición y la Figura 22 muestra la comparación entre el equilibrio vapor-líquido obtenido experimentalmente y el teórico de 1 atm. En la Figura 21, se puede observar que las dos gráficas de vapor y líquido tienen un punto en común, alrededor de 0.8 concentración molar, el cual indica la concentración del azeótropo. En la Figura 22, se puede observar que la gráfica experimental se encuentra debajo de la teórica, lo cual es justificable porque la presión del laboratorio es menor a 1 atm y las presiones de vapor de las mezclas son menores a las teóricas.

En el Cuadro 21 de Anexos, se muestra el análisis estadístico utilizando ANOVA para un factor para las tres corridas del equilibrio vapor-líquido. La prueba F se utiliza para analizar la variación entre muestras de datos. Para el análisis de los datos obtenidos en la curva de calibración, el valor de F fue de 1.25, mientras que el valor teórico fue de 3.20, por lo que la varianza entre los sets de datos no es significativa y se pueden considerar como confiables.

El simulador utiliza el método de Ponchon & Savarit para determinar el plato de alimentación. Otro método que se utiliza para el dimensionamiento de torres de destilación es de McCabe Thiele, el cual es más simple ya que simplifica las curvas de agotamiento y enriquecimiento como líneas con una sola pendiente. Se optó por utilizar el método de Ponchon & Savarit ya que considera el efecto de la entalpía en la definición de la curva de operación y permite observar que el agotamiento y enriquecimiento no son rectas sino curvas. El método consiste en determinar las curvas de entalpía de la fase de vapor y la fase de líquido para poder determinar dentro de esta gráfica la línea de alimentación mínima que cumple con el reflujo mínimo al que puede operar la torre. En un proceso continuo, se obtiene el reflujo mínimo y se debe multiplicar por un reflujo real para que cumpla con las condiciones reales de la operación. Con el reflujo real, se procede a definir los puntos de la curva de operación, dividida en enriquecimiento y agotamiento, y después se pueden determinar los platos totales de la torre y el plato de alimentación.

La Torre de Destilación del Laboratorio de Operaciones Unitarias opera de forma batch, lo cual significa que no hay una salida constante de destilados y colas, sino que la materia se mantiene dentro de la torre hasta que se detiene la alimentación. Por lo tanto, el reflujo mínimo calculado para este equipo debe ser multiplicado por un valor cercano al teórico, que es de 1.2. Al trabajar con la Torre de Destilación con las diferentes concentraciones iniciales y en diferentes platos de

alimentación, los resultados de cada corrida proporcionaban cambios en el simulador, como la determinación más exacta del plato de alimentación y el factor de reflujo mínimo. Este último tuvo un valor de 1.5. Este factor mayor al teórico demuestra el comportamiento de un reflujo total. Por lo tanto, la curva de operación de la Torre de Destilación del Laboratorio de Operaciones Unitarias está dividida en la curva de enriquecimiento y agotamiento, como se puede ver en la Figura 25 en la sección de Anexos.

Con la curva de calibración y el equilibrio vapor-líquido a las condiciones del laboratorio, se prosiguió a realizar la primera versión del simulador y trabajar con la torre destilación a diferentes concentraciones de carga inicial. Se trabajaron seis corridas de 60 L de 15%, 20%, 25% y 30% v/v de etanol como solución inicial. Se trabajó con la capacidad operativa del calderín de 60 L. La razón por la que se trabajó con las concentraciones iniciales mencionadas anteriormente es porque se considera que son posibles concentraciones de soluciones que se trabajan en la torre de platos en diferentes cursos o prácticas. Para obtener la concentración máxima de destilado, la temperatura debía ser lo más cercana a 74°C. Esta temperatura corresponde al punto de ebullición del etanol. A un rango de temperaturas en los platos de la torre entre 73°C y 77°C, la concentración de destilado obtenida fue alrededor de 93% v/v, mientras que las de las colas fue entre 1% y %. Al trabajar con un rango de temperaturas mayor, entre 77°C y 81°C, la concentración del destilado disminuía a alrededor de 91% v/v y la de las colas entre 3-4%. La diferencia puede ser leve, pero se considera importante trabajar a las temperaturas más cercanas a la temperatura de 74°C para obtener un destilado con mayor concentración de etanol. Se obtiene un destilado más concentrado debido a que a la temperatura de 74°C dentro de los platos de la Torre de Destilación se asegura que la fase de vapor es mayoritariamente etanol y no acarrea vapor de agua. Cabe mencionar que debido al funcionamiento batch de la Torre de Destilación, es decir que no hay salidas de materia durante la operación de alimentación al plato ideal, la temperatura de los platos se mantiene constante durante la alimentación. Si el proceso fuera continuo, la temperatura dentro de la torre aumentaría mientras se retira destilado porque se está retirando etanol del sistema.

En el Cuadro 9 de la sección de Resultados se puede observar la comparación de porcentajes de error entre las concentraciones obtenidas en el simulador y las obtenidas en las corridas de la Torre de Destilación del Laboratorio de Operaciones Unitarias. También se presenta la desviación estándar de los porcentajes de error para determinar si los resultados son reproducibles. En cuanto al porcentaje de error en la concentración de destilados, se pueden observar que son menores al 2%, lo cual significa que hay un 2% de error entre la concentración calculada en el

simulador y la concentración obtenida de los destilados en la operación de la Torre de Destilación. Su desviación estándar es de 0.7051%, lo cual significa que el simulador es capaz de predecir la concentración de los destilados en operación. En cuanto a las colas, podemos observar porcentajes de errores desde 7% hasta 125%. La desviación estándar de estos valores es igual a 49.15%, lo cual significa que el simulador no logró calcular con exactitud las concentraciones de etanol en las colas. Una de las razones por las que se puede explicar los valores altos de error es por la presencia de fugas en el sistema. Durante las corridas, se tuvieron fugas en mangueras, termocuplas y entre las uniones universales, por lo que las fugas permitieron la pérdida de etanol durante la operación y durante el enfriamiento del equipo una vez estuviera apagado. Además, la concentración de las colas determinada por el simulador es más alto que las que se obtienen experimentalmente, por lo que los valores bajos obtenidos en la experimentación pueden ser resultado de pérdidas de etanol por fugas.

En el Cuadro 22 de Anexos, se muestra el análisis estadístico utilizando ANOVA para dos factores de dos muestras para la validación de los valores obtenidos de concentración de destilados y colas. La prueba F se utiliza para analizar la variación entre muestras de datos. Para el análisis de los datos obtenidos en la curva de calibración, el valor de F fue de 0.27, mientras que el valor teórico fue de 4.35, por lo que la varianza entre los sets de datos de las concentraciones obtenidas experimentalmente y las obtenidas en el simulador no es significativa y se pueden considerar como confiables.

Se realizó un balance de energía para determinar las pérdidas de calor de las tres secciones de la Torre de Destilación; Calderín, Torre de Platos y Condensador, debido a que el equipo no se encuentra aislado con respecto al ambiente. Existen tres formas de transferir calor: por medio de conducción, convección y radiación. El método de convección ocurre dentro de los equipos, por lo que las pérdidas de calor serán por las formas de conducción y radiación, ya que las temperaturas de las superficies del equipo eran mayores a la temperatura ambiente promedio de 23°C del laboratorio. Se considera que todo el equipo es de acero inoxidable con un coeficiente de conducción de 0.978 kJ/m*h*K y un coeficiente de emisividad de 0.35. Se determinó la pérdida de calor de un solo plato para después aplicarlo al resto de platos. Esto se realiza considerando que todos los platos son iguales y que la torre alcanza una temperatura isotérmica en todos los platos. Cabe mencionar que, para realizar los cálculos de pérdida de calor por radiación, se considera que el laboratorio es un cuerpo negro, el cual no emite radiación, sino que solo la absorbe y, por lo tanto, su coeficiente de emisividad es igual a 1.0.

La caldera opera entre las presiones manométricas de 80 y 100 psig por cuestiones de seguridad y de entregar un vapor de calidad, por lo que se consideró que el vapor que entra al calderín se encuentra a una presión promedio de 90 psig. Agregando la presión atmosférica (14.37 psi) a la presión manométrica se obtiene la presión absoluta del vapor que entra al calderín, la cual sería de 104.37 psia. Se utilizaron tablas de vapor para determinar la entalpía correspondiente a la presión absoluta, obteniendo que la caldera entrega vapor con una entalpía 2765.02 kJ/kg. La cantidad de vapor que entra al equipo es la misma que se obtienen como condensados, pero la masa depende del tiempo de operación de la Torre de Destilación. Por lo tanto, es importante medir el tiempo de operación y la cantidad de condensados obtenidos al cerrar el flujo de vapor que entra al calderín, para calcular el flujo promedio de vapor durante la operación. Las pérdidas de conducción y radiación, correspondientes al tamaño y material del calderín, dependen de la temperatura interna y externa del equipo, así como el tiempo de operación. Los condensados que se obtienen del calderín tienen una temperatura superior a la de ambiente, por lo que también se consideran una como una pérdida de calor. Considerando una temperatura promedio de 58°C en los condensados, el calor que poseen es de 242.67 kJ/kg. El calor entregado al vapor que entra a la torre de platos depende del tiempo de operación y de la masa de vapor que entra al calderín. El flujo de salida de las colas que se muestra en el calderín no es representativo para el balance de pérdidas de energía porque no se obtiene un flujo de colas durante la operación, solamente se obtiene su masa al finalizar la operación. Por lo tanto, su energía se incluye en la energía entregada al vapor de salida del calderín que entra a la torre.

En cuanto a la torre de platos, también se considera que sus materiales son de acero inoxidable, que todos los platos son iguales y que tienen la misma pérdida de energía. Ya que la diferencia de temperatura dentro de los platos es pequeña, se consideró que la temperatura dentro de los platos es el promedio de ese rango. Se determinó la pérdida de energía de un solo plato para luego multiplicarlo por los 11 platos que tiene la torre, obteniendo así valores de pérdidas de conducción y radiación de 2082.12 kJ/h y 74.54 kJ/h, respectivamente, al tener una temperatura interna de 70°C y la temperatura externa de 74°C.

Con respecto al condensador, se debe considerar el flujo de agua que puede proporcionar la Torre de Enfriamiento. Durante las corridas, la temperatura que entraba al condensador fue de 19°C y la que salía fue de 21°C. Por lo tanto, la eliminación de calor por medio del condensador era de aproximadamente 8.368 kJ/kg de agua utilizado. La temperatura de la superficie del condensador era mayor que la de ambiente, por lo que también se determinaron las pérdidas por

conducción y radiación. Considerando que el condensador es de acero inoxidable, y que la temperatura externa es de 30°C, las pérdidas por conducción y radiación son de 418.72 kJ/h y 0.28 kJ/h, respectivamente.

El simulador realizado para este trabajo de consiste en un Menú Principal con cuatro opciones para que el usuario pueda interactuar y con hojas de cálculo que contienen los cálculos previos que se realizaron para asegurar la efectividad del simulador. El simulador contiene una hoja titulada “Operación de la Torre” donde el usuario puede visualizar todas las variables consideradas para cada una de las secciones de la Torre de Destilación. En esta hoja, el usuario debe de colocar la información experimental que obtiene durante la operación inicial de la torre de platos para determinar las concentraciones esperadas en el flujo de destilados y colas, y el plato de alimentación óptimo. La información experimental que debe colocar son temperaturas internas y externas de los equipos, flujo y temperatura de la salida y entrada de agua de enfriamiento en el condensador, temperatura de los condensados de vapor, la temperatura interna promedio de los platos y la concentración del primer destilado de la Torre de Destilación. Cada uno de estos valores tiene su propia casilla con un mensaje sobre la información del valor que debe ingresar y las restricciones del mismo. Al terminar de colocar los datos, el usuario puede dar click al botón “Calcular plato de alimentación” para obtener las concentraciones esperadas de destilados y colas, y el plato de alimentación.

Dentro de la misma hoja de “Operación de la Torre”, se puede seleccionar una de las tres opciones de visualización de datos: “Balance de Masa y Materia”, “Balance de Energía” y “Determinación de Platos”. La hoja de “Balance de Masa y Materia” muestra los cálculos previos de determinación del flujo de destilados y colas a partir de las concentraciones calculadas del simulador. La hoja de “Balance de Energía” muestra los valores de energía entregada y pérdida por cada uno de las partes de la Torre de Destilación, las cuales son Calderín, Torre de Platos y Condensador. Esta hoja toma los valores ingresados previamente por el usuario y realiza los cálculos inmediatamente. La hoja de “Determinación de Platos” muestra la gráfica de operación de la Torre de Destilación según los parámetros ingresados previamente por el usuario. Muestra una gráfica con la curva de equilibrio vapor-líquido, la curva de operación, y el dibujo de los platos de la Torre. Se colocó esta hoja en el Simulador para que el usuario pueda visualizar de mejor manera la operación de la Torre de Destilación. En esta misma hoja, aparece una opción extra titulada “Cálculos de plato de alimentación”, el cual lleva al usuario a una hoja que contiene los cálculos previos del plato de alimentación. Estos cálculos incluyen la determinación del reflujo mínimo, la

determinación de la línea de alimentación en gráfica de entalpías de vapor y líquido, y la determinación de los platos de la torre junto con el plato ideal de alimentación.

Regresando al Menú Principal, se encuentra el botón de “Determinación de concentración volumétrica y molar”, la cual permite al usuario calcular la concentración volumétrica a partir de la concentración molar o viceversa. Esta hoja se colocó dentro del simulador para permitir al usuario a realizar cálculos individuales en lugar de utilizar el botón de “Operación de la Torre”.

En la hoja de Menú Principal, también se encuentra otro botón que se titula “Determinación de concentración a partir del índice de refracción”, el cual permite al usuario determinar la concentración de una muestra individual a partir del índice de refracción. Este cálculo se puede utilizar en muestras individuales de soluciones de etanol y agua, o también en las muestras que se obtienen durante la operación de la Torre de Destilación.

La última hoja con la que puede interactuar el usuario es la que pertenece al botón “Formulación de concentración de carga inicial a partir de varias soluciones” que se encuentra en el Menú Principal. Este botón lleva al usuario a una hoja donde puede ingresar hasta diez soluciones, volumen y concentración volumétrica de las soluciones, para poder determinar la mezcla que se debe realizar para el volumen y concentración de la carga inicial de la Torre de Destilación. Durante la práctica, es poco usual partir de una solución que utiliza etanol absoluto, por lo que esta hoja tiene la utilidad de aprovechar las soluciones de diferentes concentraciones que se encuentren en el Laboratorio de Operaciones Unitarias.

El resto de las hojas que se encuentran dentro del simulador contienen información de cálculos previos que requiere el simulador para su buen funcionamiento. Dentro de estas hojas se puede mencionar la curva de calibración de la concentración molar y concentración volumétrica con el índice de refracción, la curva de equilibrio vapor-líquido de la mezcla binaria de etanol y agua, y valores teóricos de los cambios de densidad de agua de acuerdo con la temperatura.

La interfaz del simulador de la Torre de Destilación fue evaluada por estudiantes de último año de las carreras de Ingeniería Química e Ingeniería Química Industrial para determinar cambios que pudieran facilitar la interacción entre el simulador y el usuario. Los cambios que se realizaron fueron: una mejor apariencia para los botones del Menú Principal y dentro del simulador; una tabla

para ingresar los datos experimentales en la hoja de “Operación de la Torre”; mejorar instrucciones para cada variable y hoja; y mejorar la presentación de los resultados.

El Manual del Usuario es un complemento al simulador que contiene las instrucciones de como utilizar el simulador, que datos debe de ingresar y también un procedimiento del arranque y apagado de la Torre de Destilación del Laboratorio de Operaciones Unitarias.

VIII. CONCLUSIONES

1. Con la información obtenida experimentalmente, la curva de calibración etanol-agua del refractómetro y el equilibrio vapor-líquido de etanol-agua aplicables al Laboratorio de Operaciones Unitarias, se realizó el simulador de la Torre de Destilación del Laboratorio de Operaciones Unitarias utilizando el programa de Macros de Microsoft Excel; para determinar la mezcla de etanol y agua inicial que se desea trabajar, la concentración molar de muestras de etanol-agua a partir del índice de refracción, el plato de alimentación óptimo y las concentraciones esperadas de etanol en el destilado y las colas del sistema. Además, la interfaz del simulador se modificó según los comentarios de los estudiantes de último año de Ingeniería Química e Ingeniería Química Industrial que conocen sobre el funcionamiento de la Torre de Destilación.
2. Se obtuvieron los valores de la gráfica de equilibrio vapor-líquido de etanol-agua a la presión del Laboratorio de Operaciones Unitarias, la cual era de 0.978 atm, realizando destilaciones experimentales y usando la curva de calibración obtenida de 13 soluciones que relaciona la concentración volumétrica y el índice de refracción.
3. Se determinó el plato de alimentación óptimo para la operación de la Torre de Destilación del Laboratorio de Operaciones Unitarias por medio del método de Ponchon y Savarit. Se utilizaron las ecuaciones de entalpía de la fase de vapor y líquido, la determinación del reflujo real y el método de dibujo de los platos según Ponchon y Savarit. El plato de alimentación depende de las condiciones iniciales y las concentraciones de los destilados y las colas. Para condiciones iniciales de una temperatura promedio de 75°C, 82% de concentración volumétrica para la alimentación a partir de una carga inicial al 15%, la concentración del destilado es 92.21%, la de las colas sería 2.88% y el plato de alimentación sería el plato número 6.
4. Se diseñó un Manual de Usuario del simulador la Torre de Destilación del Laboratorio de Operaciones Unitarias que contiene instrucciones para el correcto uso del simulador y de la operación de la Torre de Destilación. El Manual se separa según las secciones y contiene notas e información que pueden ayudar al usuario a manejarlo de forma correcta. El Manual del Usuario se encuentra al final de la sección de Anexos del presente Trabajo.

IX. RECOMENDACIONES

El simulador de la Torre de Destilación del Laboratorio de Operaciones Unitarias solamente trabaja con la mezcla binaria de etanol y agua, por lo que se recomienda complementar o realizar otro simulador para otras mezclas de componentes que se puedan trabajar en la Torre de Destilación.

Se propone descargar el simulador y el Manual del Usuario en una computadora dentro del Laboratorio de Operaciones Unitarias para que sea accesible a los operarios que deseen utilizar la Torre de Destilación.

Se recomienda realizar revisiones periódicas a la Torre de Destilación para garantizar el buen funcionamiento del equipo y la instalación de mangueras y de los equipos auxiliares como los sensores de temperatura.

X. BIBLIOGRAFÍA

- Acosta, Patricia. (2010). *Ms Excel 2007 con Programación de Macros en VBA*. Obtenido el 15 de enero de 2022, de Aula Excel Avanzado, Blogspot: <https://www3.uji.es/~berbel/Visual%20Basic/Manuales/Excelvbaplication%202010.Pdf>
- Anderson, David; Sweeney, Dennis; William, Thomas. 2016. *Estadística para negocios y Economía* México, D.F.. 12a edición. Cengage Learning Editores. 1084 págs.
- Bedolla, Claudio, Morales-Cabrera, Miguel; Puebla, Héctor; Hernandez-Martinez, Eliseo. (2016). *Sobre el efecto del plato de alimentación en el control en columnas de destilación*. Memorias del Congreso Nacional de Control Automático. Septiembre 20-30. Universidad Veracruzana-Región Xalapa. Veracruz, México. 7-12 págs. Obtenido el 15 de enero, 2022, de: <http://amca.mx/memorias/amca2016/Articulos/0073.pdf>
- CIIQ. (2005). *Predicción del Equilibrio Líquido-Vapor por el método UNIFAC-Dortmund para el cálculo de los coeficientes de actividad mediante el software ELVIQ*. Perú. Obtenido el 25 de enero, 2022, de: http://www.ciiq.org/varios/peru_2005/Trabajos/V/3/5.3.02.pdf
- Clark, Jim. (2005). *Non-ideal Mixtures of Liquids*. ChemGuide. Reino Unido. Obtenido el 15 de enero, 2022, de: <http://www.chemguide.co.uk/physical/phaseeqia/nonideal.html>
- Diquima. (s.f.). *Funcionamiento de una torre de destilación*. Diquima. Chemical Technology Lab. Obtenido el 17 de enero, 2022, de: http://www.diquima.upm.es/old_diquima/Investigacion/proyectos/chevic/catalogo/COLU MNAS/Func1.htm
- Elogística. (s.f.). *Simulación de procesos*. Gobierno de Aragón. Obtenido el 25 de enero, 2022, de: <http://web.itainnova.es/elogistica/lineas-de-trabajo/logistica-inteligente/simulacion-de-procesos/>
- García Vázquez, Óscar; Rodríguez Salinas, Mónica Estela; Solís Lara, Pedro Fernando. (2013). *Parametrización, Simulación y Propuesta de Monitoreo de una Torre de Destilación*

binaria para la obtención de oxígeno y nitrógeno. Instituto Politécnico Nacional, Escuela Superior de Ingeniería Mecánica y Eléctrica. México. 136 págs. Obtenido el 17 de enero, 2022, de: <https://tesis.ipn.mx/bitstream/handle/123456789/13785/tesis%20torre%20de%20destilacion.pdf?sequence=1&isAllowed=y>

Guasch, Antoni; Piera, Miquel Àngel; Casanovas, Josep; Figueras, Jaume. (2003). Segunda Edición. Ediciones de la Unisersitat Politècnica de Catalunya, SL. España. 311 págs. Obtenido el 25 de enero, 2022, de: <https://books.google.com.gt/books?id=KZDPoE0uWTkC&pg=PA242&dq=que+es+una+simulaci%C3%B3n&hl=es&sa=X&ved=2ahUKewib1s-Is9D1AhXMRjABHUhNCP0Q6AF6BAgDEAI#v=onepage&q=que%20es%20una%20simulaci%C3%B3n&f=false>

Herráez, Jose V.; Belda, R. (2006). *Refractive Indices, Densidities and Excess Molar Volumes of Monoalcohols + Water*. *Journal of Solution Chemistry*. Número 35. España Valencia. 1315-1328 págs. Obtenido el 20 de mayo, 2022, de: <https://link.springer.com/article/10.1007/s10953-006-9059-4>

IONOS. (2019). *Macros en Excel: optimiza tu trabajo con las hojas de cálculo*. Digital Guide IONOS. Obtenido el 25 de enero, 2022, de: <https://www.ionos.es/digitalguide/online-marketing/vender-en-internet/macros-en-excel-que-son-y-por-que-son-tan-utiles/>

León Díaz, Gustavo A. (2013). *Desarrollo de una Herramienta Libre para la Simulación Rigurosa de Columnas de Destilación en Estado Estacionario*. Universidad de los Andes. Colombia. 112 págs. Obtenido el 25 de enero, 2022, de: https://www.researchgate.net/publication/323254600_Desarrollo_de_una_Herramienta_Libre_para_la_Simulacion_Rigurosa_de_Columnas_de_Destilacion_en_Estado_Estacionario_Development_of_an_Open_Source_Tool_for_Rigorous_Distillation_Column_Simulation_in_Stea

McCabe, Warren L.; Smith, Julian C.; Harriott, Peter. (2007). *Operaciones Unitarias en Ingeniería Química*. Séptima edición. Editorial McGraw-Hill Interamericana. México. 1212 págs.

- MKT. (2021). *Tipos de simulaciones*. Blog de LABSAG, Laboratorio de Simuladores en Administración y Gerencia. Obtenido el 25 de enero, 2022, de: <https://labsag.co.uk/blog/index.php/2021/08/16/tipos-de-simulaciones/>
- Montoya Mistretta, Alejandra. (2012). *Diseño de una columna de destilación para la recuperación de una sustancia termosensible*. Universidad Católica de Valparaíso, Facultad de Ingeniería. 102 págs. Obtenido el 15 de enero, 2022, de: http://opac.pucv.cl/pucv_txt/txt-3000/UCF3374_01.pdf
- MSU. (s.f.) *ASPEN Tutorial*. Michigan State University. College of Engineering. Chemical Engineering and Materials Science. Estados Unidos. Obtenido el 25 de enero, 2022, de: <https://www.chems.msu.edu/resources/tutorials/ASPEN>
- Pasto, Daniel J.; Johson, Carl R. (2003). *Determinación de estructuras orgánicas*. Editorial Reverté, S.A. Primera edición. España: Barcelona. 550 págs. Obtenido el 30 de agosto, 2022, de: https://books.google.com.gt/books?id=uHNdHS8JXFIC&pg=PA73&dq=indice+de+refraccion&hl=es&sa=X&ved=2ahUKEwjhkYeUIO_5AhV9mmoFHQ0FB_cQ6AF6BAgJEAI#v=onepage&q=indice%20de%20refraccion&f=false
- Pérez Ones, Osney; Díaz Rodríguez, Jorge; Zumalacárregui, Lourdes; Gozá León, Osvaldo. (2009). *Evaluación de propiedades físicas de mezclas etanol-agua (II)*. Revista Facultad de Ingeniería Universidad de Antioquía. Número 52. Cuba: Habana. 62-74 págs. Obtenido el 20 de mayo, 2022, de: <http://www.scielo.org.co/pdf/rfiua/n52/n52a06.pdf>
- Perry, Robert H.; Green, Don W. (1997). *Perry's Chemical Engineers' Handbook. Chapter 13: Distillation*. Séptima edición. McGRAW-HILL: Estados Unidos. 2582 págs.
- Smith, J. M.; Van Ness, H.C.; Abbott, M. M. (2007). *Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química*. Séptima edición. McGRAW-HILL: Estados Unidos. 816 págs.
- Treybal, Robert E. (1980). *Operaciones de Transferencia de Masa*. Segunda Edición. McGRAW-HILL: Estados Unidos. 858 págs.

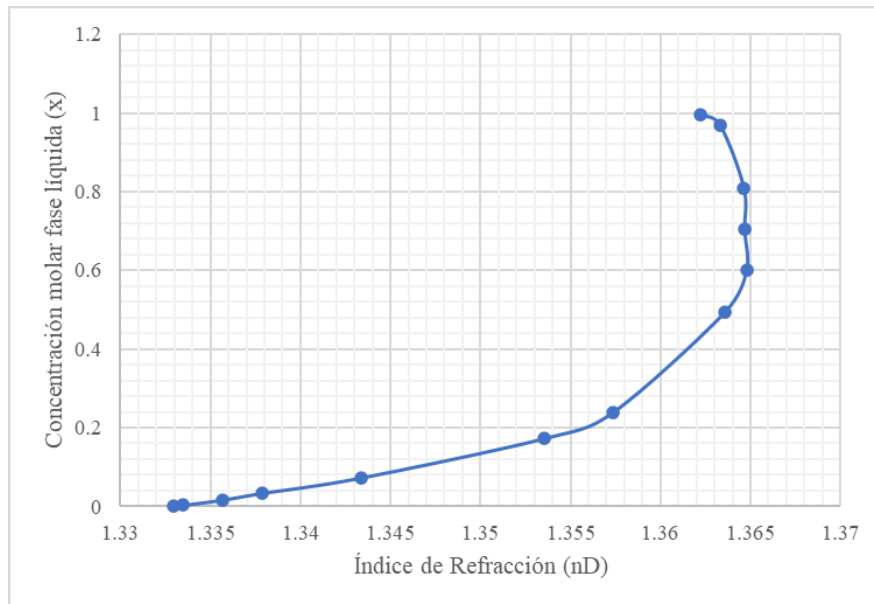
Zapata, José. (s.f.). *Tipos de simulación*. IUPSM Simulación. Investigación de Operaciones I. Obtenido el 26 de enero, 2022, de: <https://iupsm simulacion.wordpress.com/tipos-de-simulacion/>

XI. ANEXOS

Cuadro 13. Índice de refracción de diferentes soluciones de etanol-agua.

Solución	Concentración %v/v	M1 mol etanol	x1 etanol	Índice de refracción (nD)			
				1	2	3	Promedio
1	0.00%	0.0000	0.0000	1.33298	1.33296	1.33295	1.33296
2	1.00%	0.0172	0.0031	1.33350	1.33350	1.33347	1.33349
3	5.00%	0.0862	0.0162	1.33563	1.33565	1.33563	1.33564
4	9.99%	0.1725	0.0336	1.33788	1.33790	1.33789	1.33789
5	19.98%	0.3450	0.0725	1.34329	1.34336	1.34337	1.34334
6	39.96%	0.6899	0.1724	1.35339	1.35355	1.35362	1.35352
7	49.95%	0.4312	0.2380	1.35721	1.35741	1.35737	1.35733
8	75.68%	0.6533	0.4934	1.35963	1.35960	1.35827	1.35917
9	82.72%	0.7141	0.5997	1.36269	1.36261	1.36248	1.36259
10	88.36%	0.7628	0.7038	1.36443	1.36443	1.36437	1.36441
11	93.15%	0.8042	0.8098	1.36460	1.36464	1.36466	1.36463
12	99.00%	0.8546	0.9688	1.36315	1.36352	1.36328	1.36332
13	99.90%	1.7248	0.9968	1.36257	1.36252	1.36248	1.36252

Figura 23. Relación entre índice de refracción y concentración molar en la fase líquida.



Cuadro 14. Medición de índice de refracción de muestras obtenidas en cada plato durante la operación de la corrida del 24 de junio, 2022.

Ubicación	Medición				
	1	2	3	4	5
Zero	1.33292	1.33293	1.33293	1.33292	1.33292
1	1.36444	1.36427	1.36425	1.36427	1.36423
2	1.36335	1.36398			
3	1.3645	1.36458	1.36453	1.36456	1.36456
4	1.36447	1.3645	1.36449	1.36447	1.36443
5	1.36435	1.36432	1.36435	1.36417	1.36351
6	1.36418	1.36398	1.3638	1.36384	1.36351
7	1.36329	1.36255	1.3626	1.36248	1.36166
8	1.36161	1.36039	1.36059	1.36035	1.35895
9	1.35542	1.35527	1.35541	1.35421	1.35266
10	1.36005	1.36109	1.36244	1.36204	1.36208
11	1.3635	1.36413	1.36432	1.36364	1.36386

Cuadro 15. Medición de índice de refracción de muestras obtenidas en cada plato durante la operación de la corrida del 28 de junio, 2022.

Ubicación	Medición			
	1	2	3	4
Zero	1.33294	1.33288	1.33294	1.3329
1	1.36423	1.36426	1.36433	1.36432
2	1.3645	1.36453	1.36452	1.3645
3	1.36453	1.3645	1.36454	1.36456
4	1.36449	1.36453	1.36451	1.36454
5	1.36434	1.3645	1.36454	1.36452
6	1.36392	1.36444	1.36437	1.36441
7	1.36329	1.36432	1.36398	1.36369
8	1.36322	1.3627	1.36206	1.36208
9	1.36084	1.36026	1.35667	1.35533
10	1.36203	1.36265	1.36273	1.36303
11	1.36375	1.36362	1.36369	1.36364

Cuadro 16. Medición de índice de refracción de muestras obtenidas en cada plato durante la operación de la corrida del 19 de julio, 2022.

Ubicación	Medición				
	1	2	3	4	5
Zero	1.33294	1.33288	1.33294	1.3329	1.33289
1	1.36456	1.36448	1.36454	1.36446	1.36449
2	1.36417	1.36453	1.36467	1.36466	1.36462
3	1.36467	1.36469	1.36464	1.36461	1.36465
4	1.3644	1.36458	1.36463	1.36462	1.36467
5	1.36444	1.36464	1.36466	1.36461	1.36466
6	1.36458	1.36462	1.36456	1.36457	1.36459
7	1.36444	1.3643	1.36444	1.36441	1.36433
8	1.36428	1.36403	1.3641	1.36404	1.36396
9	1.3631	1.36326	1.36328	1.36299	1.36314
10	1.36368	1.36405	1.36417	1.36404	1.36417
11	1.36436	1.36446	1.36431	1.36451	1.36452

Cuadro 17. Medición de índice de refracción de muestras obtenidas en cada plato durante la operación de la corrida del 26 de julio, 2022.

Ubicación	Medición			
	1	2	3	4
Zero	1.33294	1.33288	1.33294	1.3329
1	1.36484	1.3646	1.36449	1.3646
2	1.3443	1.35196	1.35953	1.36306
3	1.36474	1.36461	1.36467	1.36467
4	1.36473	1.36465	1.36466	1.36465
5	1.36472	1.36467	1.36462	1.36466
6	1.36488	1.36464	1.36456	1.36456
7	1.36453	1.36454	1.36454	1.36446
8	1.36407	1.36411	1.36407	1.36405
9	1.36258	1.36235	1.36207	1.36172
10	1.36328	1.36207	1.3634	1.3637
11	1.36328	1.36399	1.36425	1.36421

Cuadro 18. Medición de índice de refracción de muestras obtenidas en cada plato durante la operación de la corrida del 02 de agosto, 2022.

Ubicación	Medición				
	1	2	3	4	5
Zero	1.33294	1.33288	1.33294	1.3329	1.33289
1	1.36442	1.3644	1.36453	1.3645	1.3645
2	1.36469	1.36465	1.36467	1.3647	1.3647
3	1.3646	1.36464	1.36464	1.36468	1.36468
4	1.36463	1.36462	1.36467	1.36467	1.36471
5	1.36468	1.36463	1.36468	1.36469	1.36467
6	1.36465	1.36465	1.36467	1.36468	1.36464
7	1.36465	1.36461	1.36462	1.36461	1.36463
8	1.36459	1.36437	1.36433	1.36428	1.3643
9	1.36406	1.36359	1.36346	1.36346	1.36343
10	1.3642	1.36427	1.36421	1.36431	1.36433
11	1.36444	1.36462	1.36415	1.36426	1.36421

Cuadro 19. Medición de índice de refracción de muestras obtenidas en cada plato durante la operación de la corrida del 22 de agosto, 2022.

Ubicación	Medición				
	1	2	3	4	5
Zero	1.33294	1.33288	1.33294	1.3329	1.33289
1	1.36461	1.36452	1.36444	1.36434	1.36433
2	1.35891	1.35999	1.36137	1.36102	1.36069
3	1.36465	1.36459	1.3643	1.36427	1.36436
4	1.36435	1.36465	1.36444	1.36431	1.36434
5	1.36454	1.36461	1.36451	1.36436	1.36428
6	1.36384	1.36464	1.36464	1.36444	1.36439
7	1.36389	1.36429	1.36459	1.36461	1.36462
8	1.35979	1.36389	1.36451	1.36463	1.36463
9	1.35857	1.36275	1.36353	1.36381	1.36352
10	1.35716	1.3592	1.35965	1.35926	1.35934
11	1.35942	1.3615	1.36178	1.3619	1.36173

Cuadro 20. Análisis estadístico con Prueba F de los valores obtenidos para la curva de calibración.

Análisis de varianza de un factor

RESUMEN						
<i>Grupos</i>	<i>Cuenta</i>	<i>Suma</i>	<i>Promedio</i>	<i>Varianza</i>		
Columna 1	13	17.57095	1.351611538	0.000166345		
Columna 2	13	17.57165	1.351665385	0.00016698		
Columna 3	13	17.56984	1.351526154	0.000164655		

ANÁLISIS DE VARIANZA						
<i>Origen de las variaciones</i>	<i>Suma de cuadrados</i>	<i>Grados de libertad</i>	<i>Promedio de los cuadrados</i>	<i>F</i>	<i>Probabilidad</i>	<i>Valor crítico para F</i>
Entre grupos	1.28159E-07	2	6.40795E-08	0.000386037	0.999614042	3.259446306
Dentro de los grupos	0.005975758	36	0.000165993			
Total	0.005975886	38				

Cuadro 21. Análisis estadístico con Prueba F de los valores de la fase líquida para la gráfica EVL obtenidos en las destilaciones simples

Análisis de varianza de un factor

RESUMEN						
<i>Grupos</i>	<i>Cuenta</i>	<i>Suma</i>	<i>Promedio</i>	<i>Varianza</i>		
Columna 1	10	4.16180067	0.416180067	0.09743647		
Columna 2	19	5.40684632	0.284570859	0.12043252		
Columna 3	19	4.18243868	0.220128351	0.08173765		

ANÁLISIS DE VARIANZA						
<i>Origen de las variaciones</i>	<i>Suma de cuadrados</i>	<i>Grados de libertad</i>	<i>Promedio de los cuadrados</i>	<i>F</i>	<i>Probabilidad</i>	<i>Valor crítico para F</i>
Entre grupos	0.251938609	2	0.125969304	1.25523242	0.294796803	3.204317292
Dentro de los grupos	4.5159913	45	0.100355362			
Total	4.767929909	47				

Cuadro 22. Análisis estadístico con Prueba F de los resultados obtenidos en las corridas de la Torre de Destilación.

	Esperado	Experimental
Destilados	93%	93.00%
	93%	93.00%
	92%	93.10%
	89%	89.21%
	92%	92.90%
	92%	94.00%
Colas	2.00%	2%
	2.40%	1%
	2.88%	1%
	7.03%	8%
	3.81%	10%
	2.88%	2%

Análisis de varianza de dos factores con varias muestras por grupo

RESUMEN	Esperado	Experimental	Total
<i>Destilados</i>			
Cuenta	6	6	12
Suma	5.5188	5.5521	11.0709
Promedio	0.9198	0.92535	0.922575
Varianza	0.00020614	0.000281735	0.000230162
<i>Colas</i>			
Cuenta	6	6	12
Suma	0.21	0.2377	0.4477
Promedio	0.035	0.039616667	0.037308333
Varianza	0.000335716	0.001473962	0.000828394
<i>Total</i>			
Cuenta	12	12	
Suma	5.7288	5.7898	
Promedio	0.4774	0.482483333	
Varianza	0.213756582	0.214759009	

ANÁLISIS DE VARIANZA

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Muestra	4.702182427	1	4.702182427	8186.4194	1.3039E-27	4.351243503
Columnas	0.000155042	1	0.000155042	0.2699249	0.609084703	4.351243503
Interacción	1.30667E-06	1	1.30667E-06	0.0022749	0.962431796	4.351243503
Dentro del grupo	0.011487763	20	0.000574388			
Total	4.713826538	23				

Figura 24. Mapa de proceso e introducción de variables.

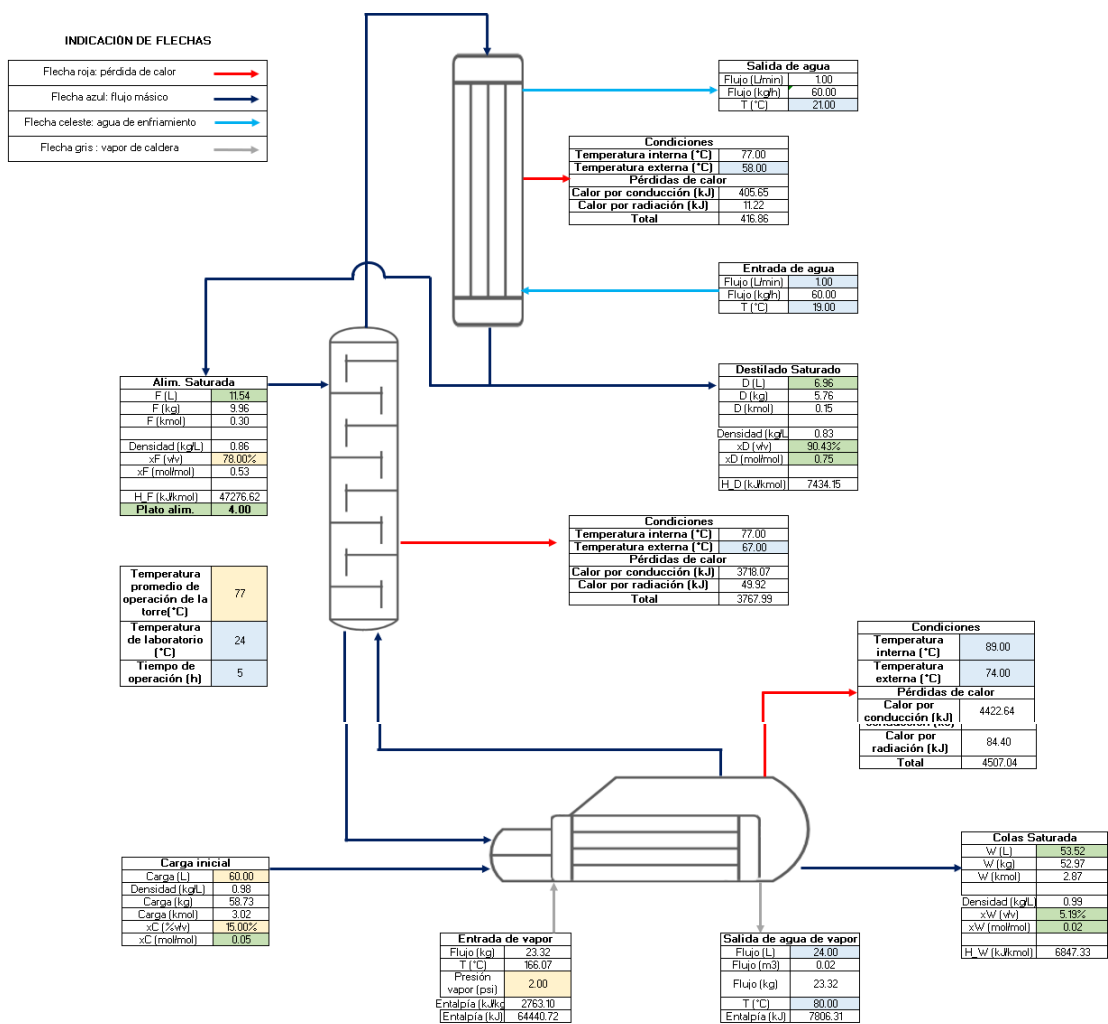
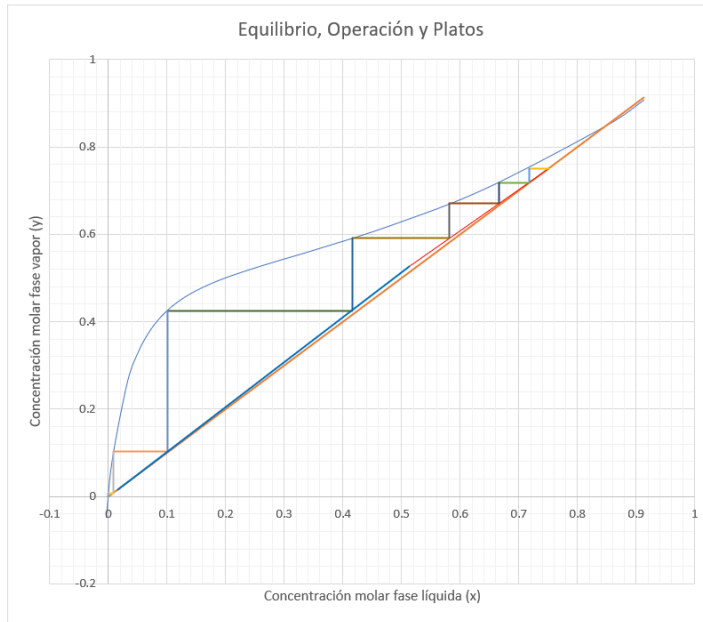


Figura 25. Diagrama de platos con curva de equilibrio, curva de operación y recta diagonal.



Los platos totales para realizar la operación son:	6
La alimentación debe realizarse en el plato:	4

Menú Principal

Operación de la Torre

Cálculos de plato de alimentación

Figura 26. Determinación de líneas arbitrarias para la determinación de la curva de operación.

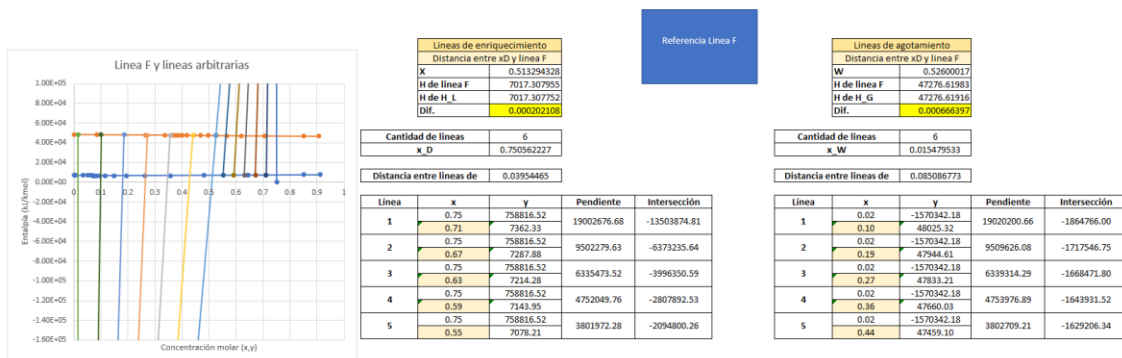


Figura 27. Determinación de puntos para la curva de operación.

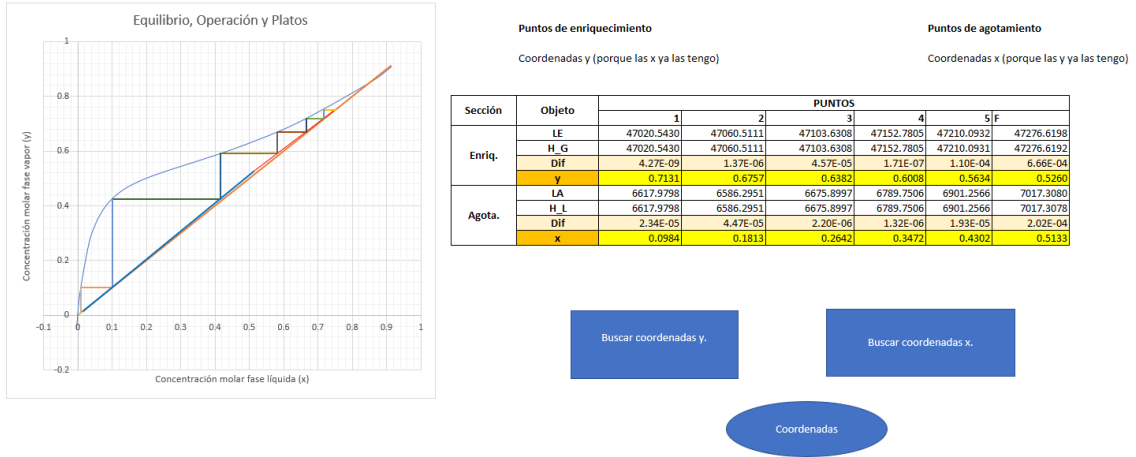


Figura 28. Determinación de platos de operación y el plato de alimentación.



Figura 29. Plano del calderín vista lateral.

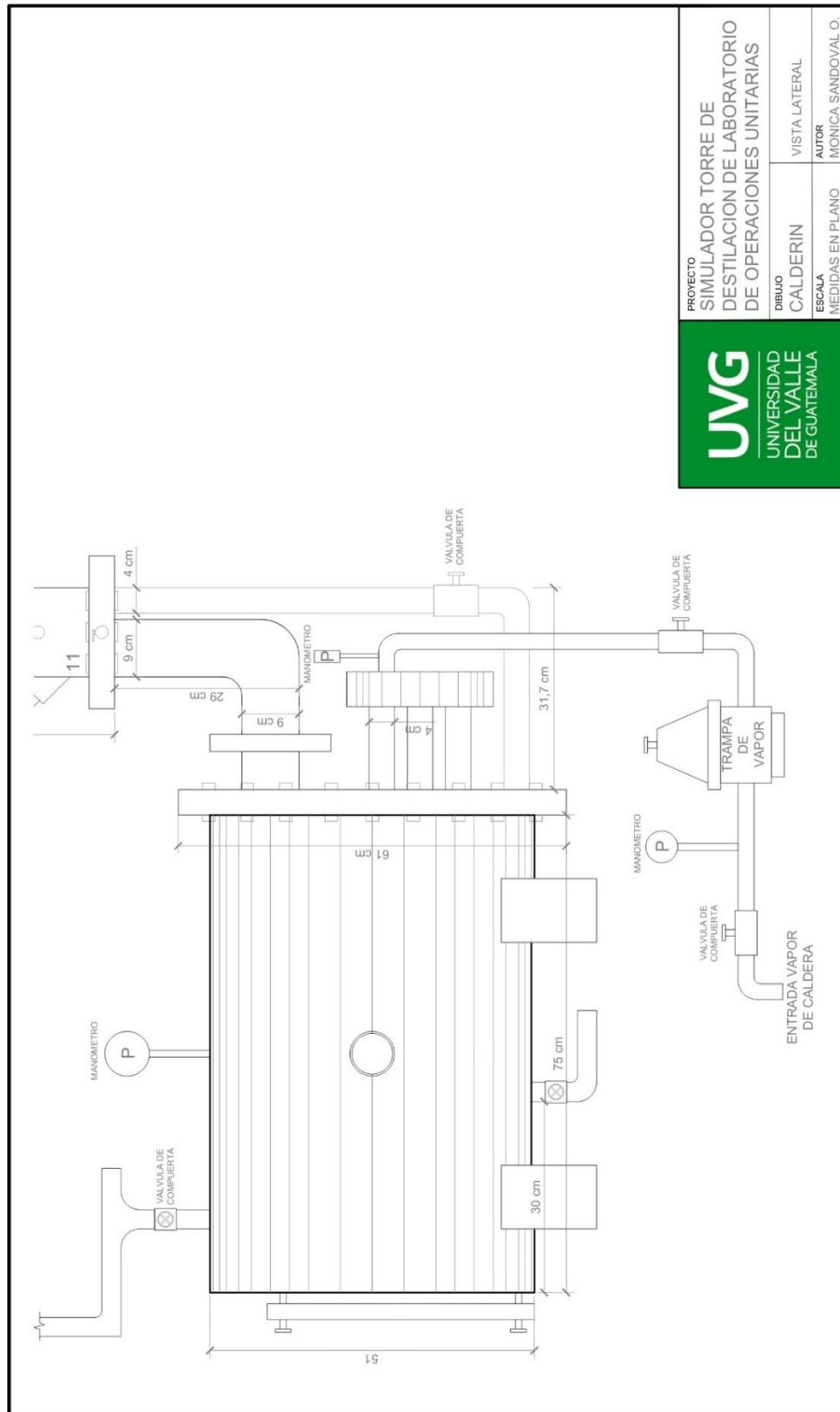
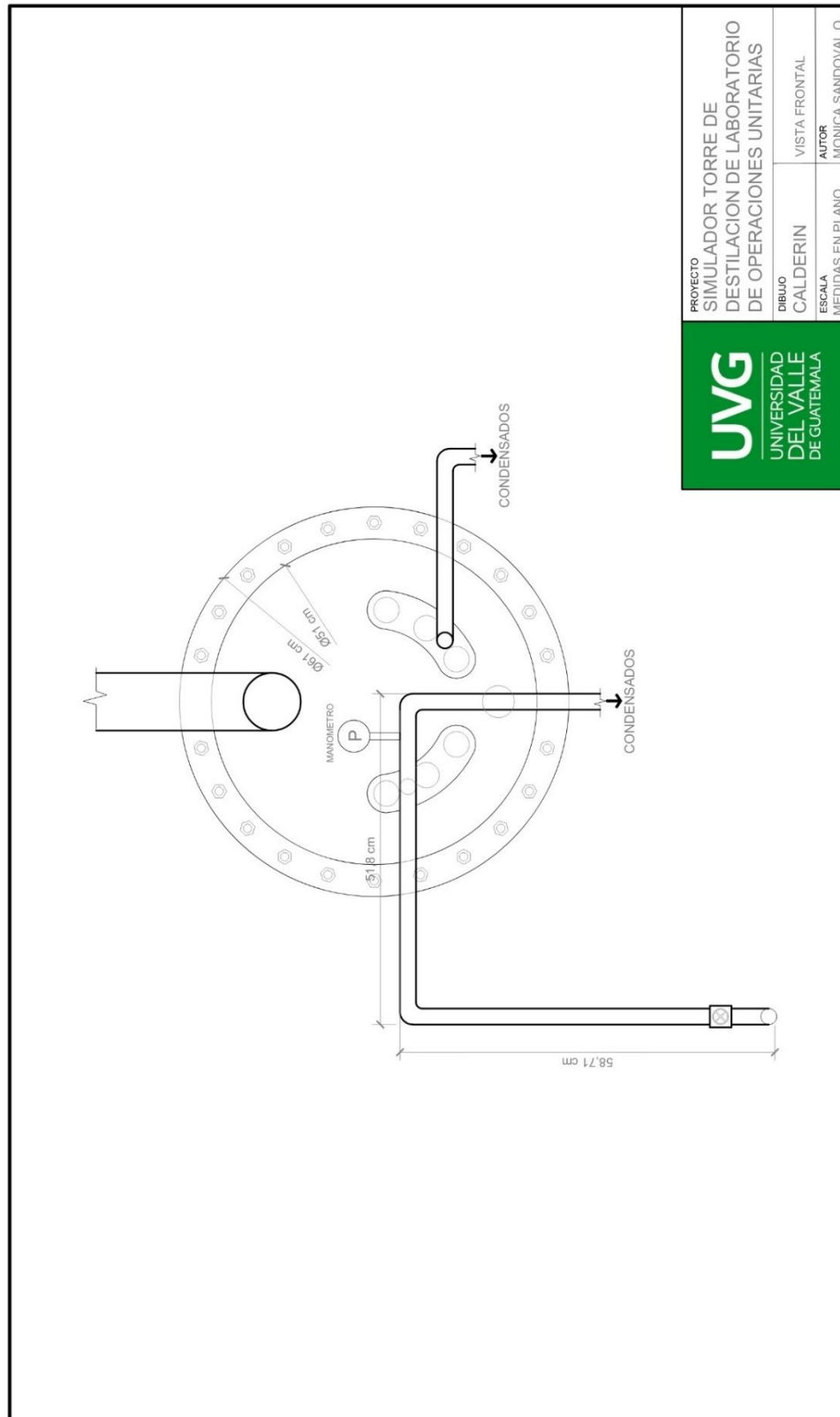


Figura 30. Plano del calderín vista frontal.



UNVG UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA	PROYECTO	SIMULADOR TORRE DE DESTILACION DE LABORATORIO DE OPERACIONES UNITARIAS	
	DIBUJO	CALDERIN	VISTA FRONTAL
	ESCALA	MEDIDAS EN PLANO	AUTOR MONICA SANDOVAL O.

Figura 31. Plano de platos vista lateral.

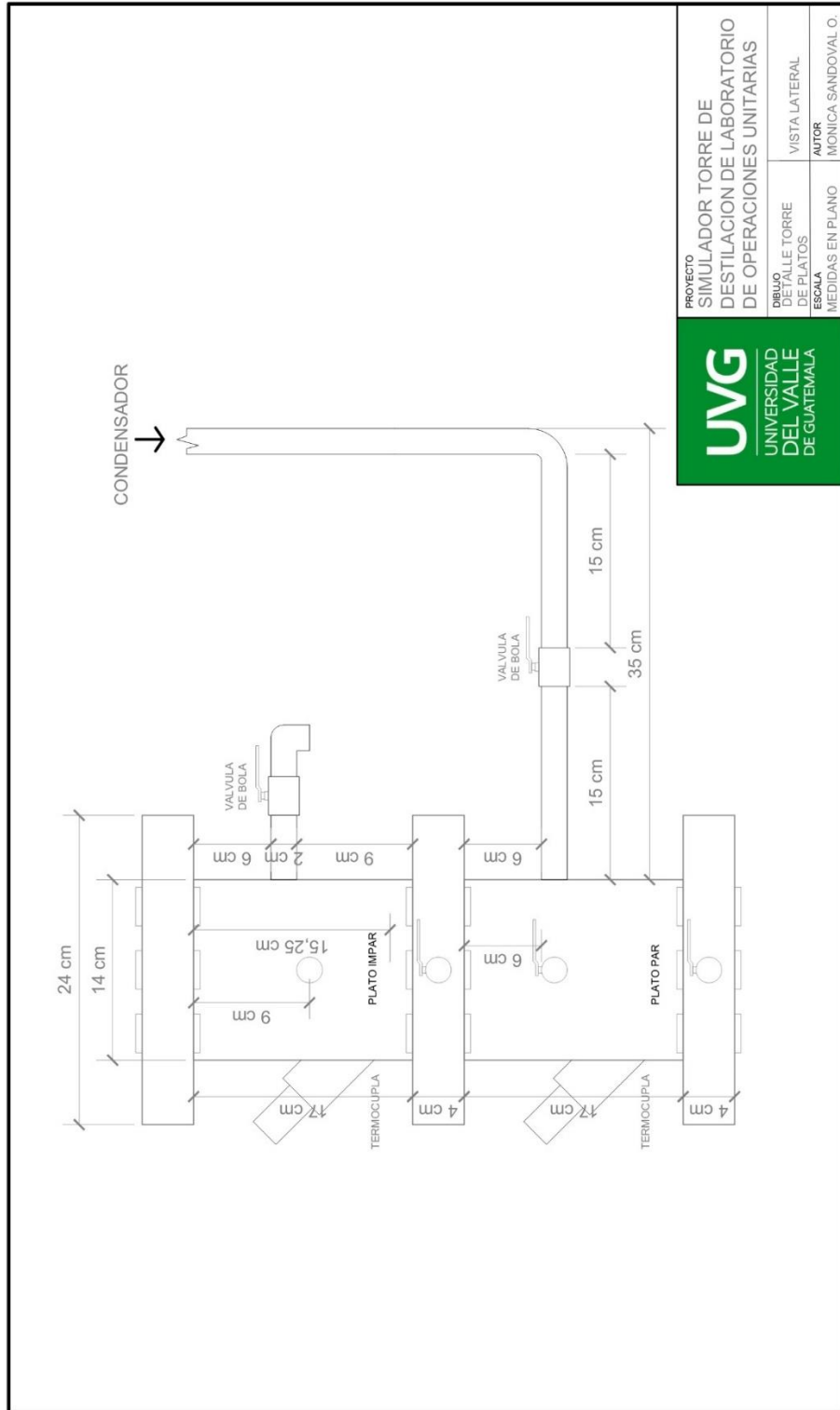
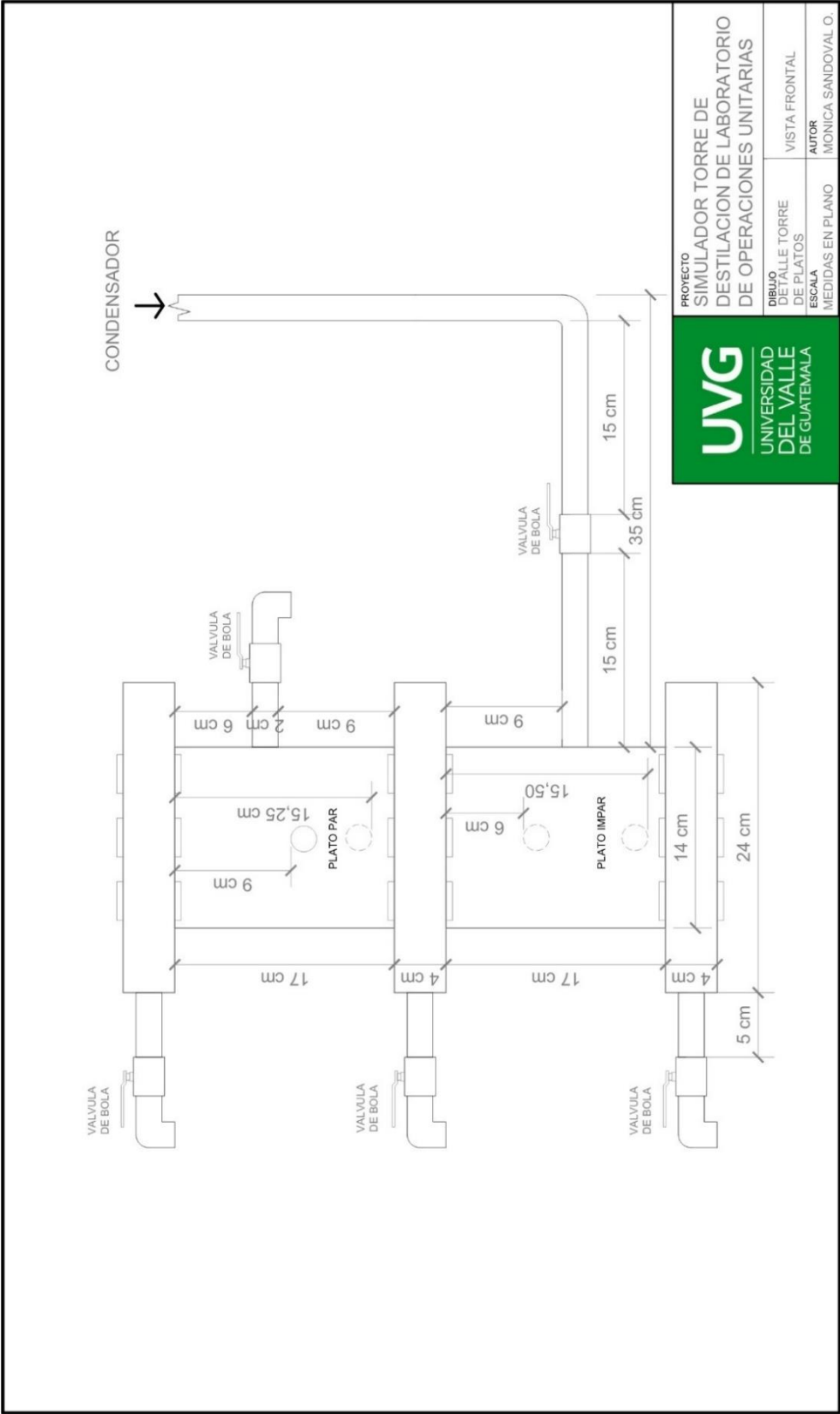


Figura 32. Plano de platos vista frontal.

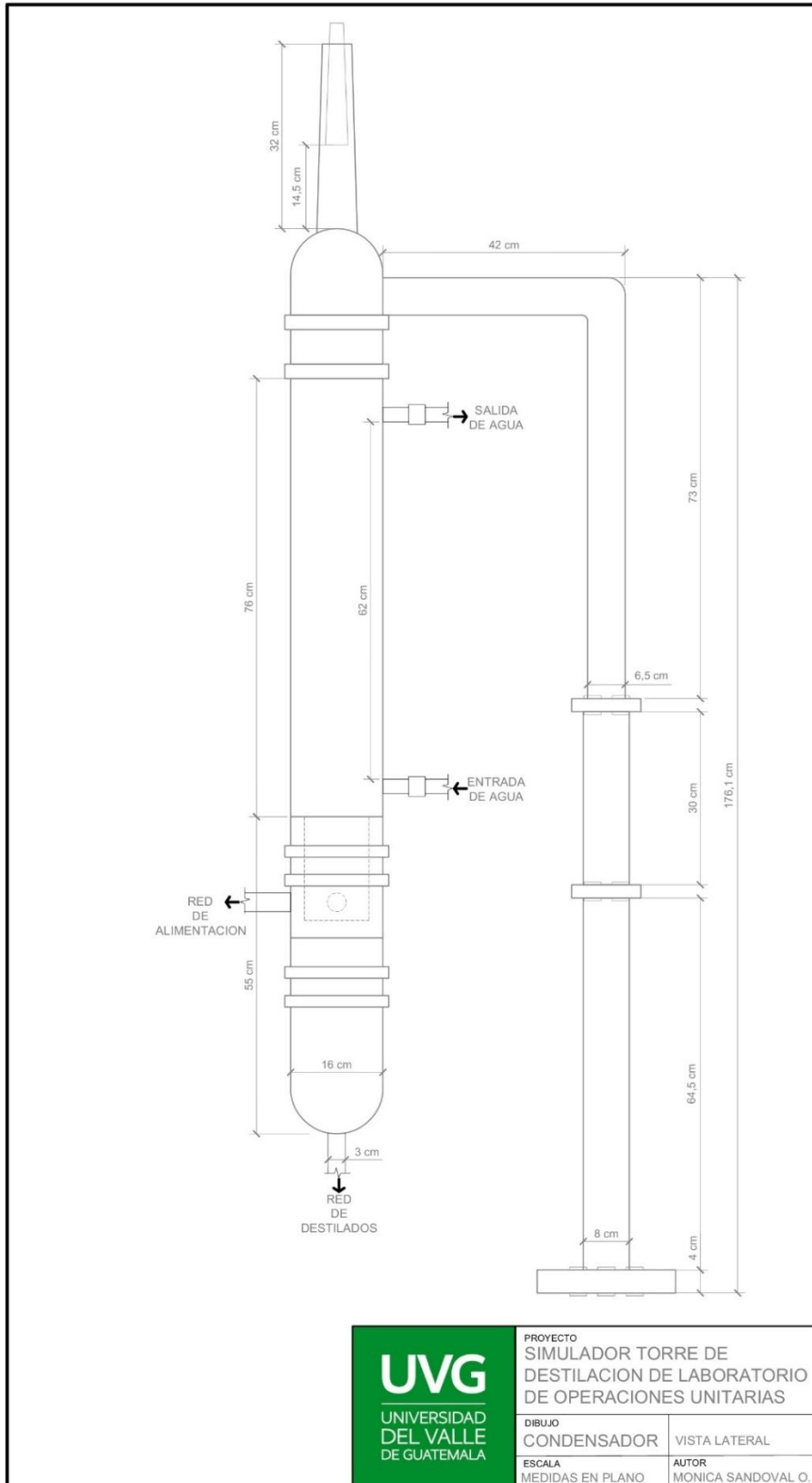


UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

PROYECTO: SIMULADOR TORRE DE DESTILACION DE LABORATORIO DE OPERACIONES UNITARIAS

DETALLE TORRE DE PLATOS	VISTA FRONTAL
ESCALA	AUTOR
MEDIDAS EN PLANO	MONICA SANDOVAL O.

Figura 35. Plano de condensador vista lateral.



 UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA	PROYECTO SIMULADOR TORRE DE DESTILACION DE LABORATORIO DE OPERACIONES UNITARIAS	
	DIBUJO CONDENSADOR	VISTA LATERAL
	ESCALA MEDIDAS EN PLANO	AUTOR MONICA SANDOVAL O.

Figura 36. Plano de red de destilados

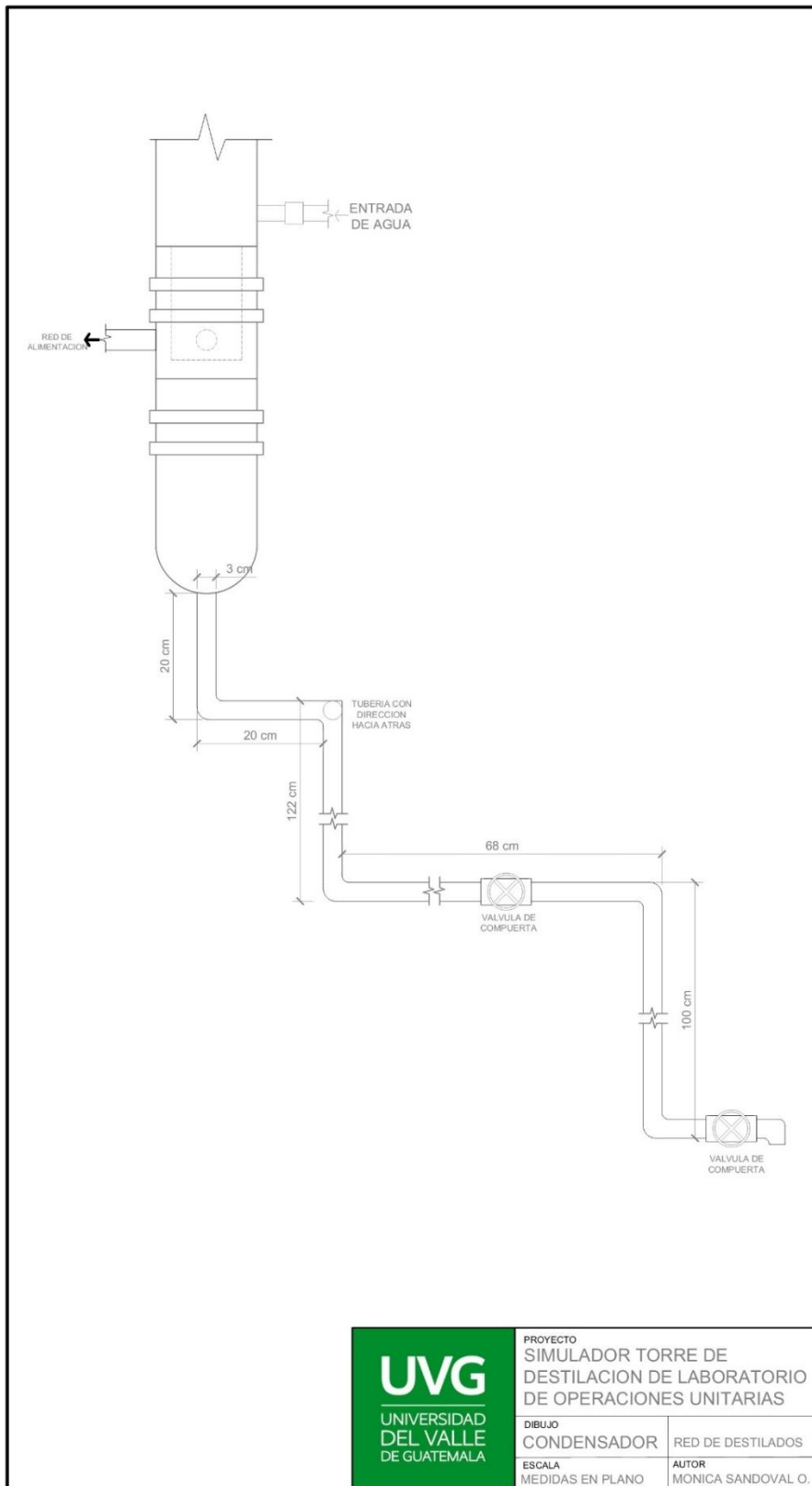
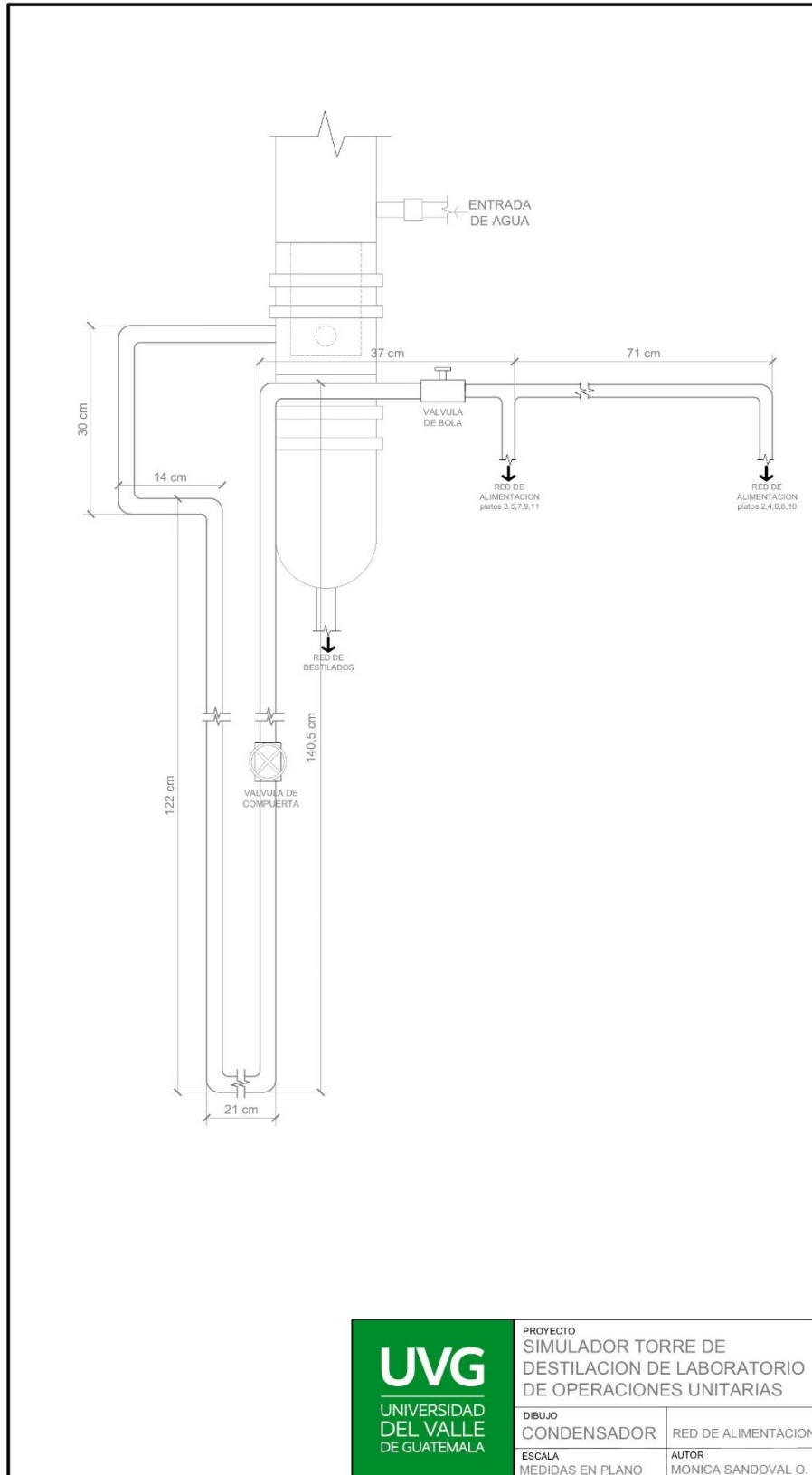


Figura 37. Plano de red de alimentación.



 UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA	PROYECTO SIMULADOR TORRE DE DESTILACION DE LABORATORIO DE OPERACIONES UNITARIAS	
	DIBUJO CONDENSADOR	RED DE ALIMENTACION
	ESCALA MEDIDAS EN PLANO	AUTOR MONICA SANDOVAL O.

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Facultad de Ingeniería



Manual de Usuario para el simulador para la operación tipo
batch de la Torre de Destilación del Laboratorio de
Operaciones Unitarias de la Universidad del Valle de
Guatemala para separación de etanol de mezclas etanol-agua

Mónica Lucía Sandoval Osorio

Guatemala
2022

ÍNDICE

I.	Introducción.....	2
II.	Simulador de Torre de Destilación.....	3
III.	Partes de Simulador.....	4
1.	Menú Principal.....	4
1.1	Operación de la Torre	4
1.1.1	Balance de Masa y Materia	12
1.1.2	Balance de Energía	13
1.1.3	Determinación de Platos	15
1.1.4	Cálculos de Plato de Alimentación	16
1.2	Determinación de Concentración volumétrica y molar	17
1.3	Determinación de la concentración a partir del índice de refracción.....	18
1.4	Formulación de Concentración de carga inicial a partir de varias soluciones.....	19
2.	Demostración de Cálculos Previos adicionales.....	20
IV.	Guía de Operación.....	21
1.	Torre de Destilación	21
2.	Refractómetro	23

I. Introducción

La destilación es una de las operaciones unitarias más utilizadas en la industria. Es un proceso cuyo objetivo es separar los compuestos de una mezcla líquida miscible de acuerdo con sus volatilidades y de esta forma purificar las sustancias líquidas. La volatilidad es la capacidad que tiene un compuesto para cambiar de estado líquido a estado gaseoso. A escala laboratorio, la destilación es una práctica de purificación sencilla que trabaja con cargas pequeñas y que permite conocer las propiedades termodinámicas de los compuestos que conforman la mezcla. La destilación se utiliza en diferentes industrias, como en la obtención de reactivos volátiles, obtención de bebidas alcohólicas, producción de aceites esenciales, refinamiento de petróleo y otros productos petroquímicos.

Para cualquier proceso de destilación, el primer paso es el dimensionamiento del equipo. Un buen dimensionamiento provee muchas ventajas como aprovechamiento de espacio, presupuesto, reactivos y equipos auxiliares. En una operación de una torre de destilación, se requieren de equipos auxiliares como una Caldera y una Torre de Enfriamiento. Si la torre de platos tiene un buen diseño, el vapor que se genera en la Caldera y el agua de la Torre de Enfriamiento serán aprovechadas de mejor manera. El dimensionamiento de una torre de destilación puede realizarse por dos métodos, McCabe Thiele y Ponchon y Savarit. El primer método se puede utilizar como una aproximación a la cantidad de platos que requiere la torre de destilación para cierta operación. El segundo es el método más exacto, ya que considera la entalpía de la fase líquida y gaseosa para tener una mejor aproximación de la curva de operación.

II. Simulador de Torre de Destilación

El Simulador de la Torre de Destilación del Laboratorio de Operaciones Unitarias fue realizado en Microsoft Excel utilizando cálculos propios de Excel y de la herramienta Macros Visual Basic. Se realizaron corridas experimentales que justifican la efectividad del simulador para ser utilizado en prácticas propias del Departamento de Ingeniería Química.

Sus cálculos se basan en curvas de calibración de etanol agua, equilibrio vapor líquido y en la determinación de plato de alimentación. El simulador depende de datos experimentales para poder pronosticar las concentraciones de destilados y colas que se obtengan de la práctica.

III. Partes de simulador

1. Menú Principal

El simulador realizado para este trabajo de consiste en un Menú Principal con cuatro opciones para que el usuario pueda interactuar y con hojas de cálculo que contienen los cálculos previos que se realizaron para asegurar la efectividad del simulador. En el Menú Principal aparece un breve resumen de la importancia del dimensionamiento de una torre de destilación y el propósito del simulador. Las cuatro opciones que presenta el Menú Principal están en la siguiente imagen y se explicará cada una de ellas.

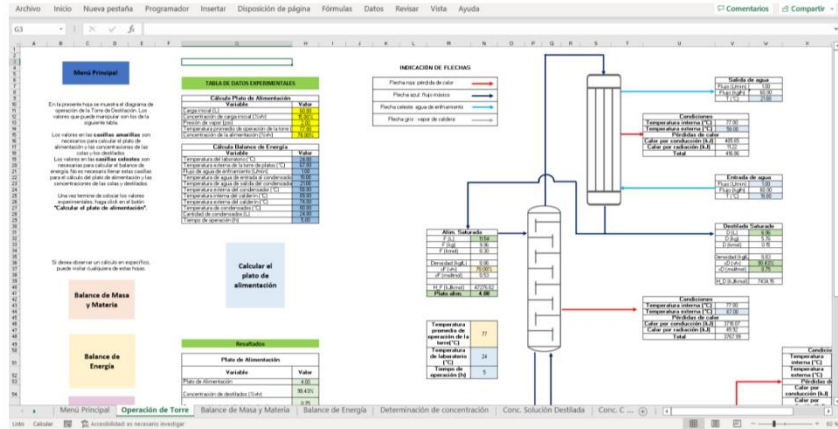
Figura 1. Menú Principal del simulador



1.1 Operación de la Torre

La primera opción del Menú Principal es el de “Operación de la Torre” donde el usuario puede visualizar todas las variables consideradas para cada una de las secciones de la Torre de Destilación. En esta hoja, el usuario debe de colocar la información experimental que obtiene durante la operación inicial de la torre de platos para determinar las concentraciones esperadas en el flujo de destilados y colas, y el plato de alimentación óptimo.

Figura 2. Opción de “Operación de la Torre”.



Como se puede ver en la Figura 2, el Menú Principal, la Operación de la Torre se divide en tres secciones. En la parte de la izquierda, se tiene el botón de Menú Principal por si el usuario desea elegir alguna de las otras tres opciones iniciales, una breve descripción de la hoja actual, y otras tres opciones de hoja en la que el usuario puede ver diferentes cálculos más no interactuar con ellos. Estas tres secciones se explicarán más adelante.

Figura 3. Sección izquierda de “Operación de la Torre”.

Menú Principal

En la presente hoja se muestra el diagrama de operación de la Torre de Destilación. Los valores que puede manipular son los de la siguiente tabla.

Los valores en las **casillas amarillas** son necesarios para calcular el plato de alimentación y las concentraciones de las colas y los destilados.

Los valores en las **casillas celestes** son necesarias para calcular el balance de energía. No es necesario llenar estas casillas para el cálculo del plato de alimentación y las concentraciones de las colas y destilados.

Una vez termine de colocar los valores experimentales, haga click en el botón **"Calcular el plato de alimentación"**.

Si desea observar un cálculo en específico, puede visitar cualquiera de estas hojas.

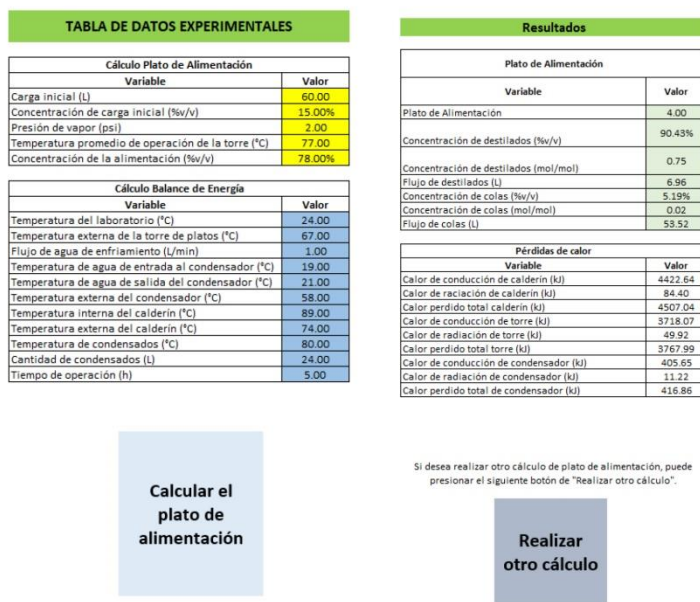
**Balance de Masa
y Materia**

**Balance de
Energía**

**Determinación de
Platos**

La sección central de la hoja “Operación de la Torre” muestra una tabla con los datos iniciales que se deben de colocar en el sistema, el botón de “Calcular plato de alimentación”, la tabla de resultados y el botón de “Realizar otro cálculo”. El primer botón funciona cuando se han colocado los datos de la tabla con casillas amarillas. El plato de alimentación no necesita de los datos en la tabla celeste para poder ser calculado.

Figura 4. Tablas de datos iniciales y de resultados.



En esta sección se muestran tablas de datos con casillas de color amarillo y casillas de color verde claro. Estas últimas hacen referencia a información que es de interés para el usuario, como las concentraciones volumétricas y molares de las soluciones y el plato de alimentación. Las casillas amarillas son las que el usuario debe llenar con la información experimental de la corrida con la Torre de Destilación. Como se puede observar en la Figura 5, al seleccionar cualquiera de las casillas amarillas aparece un cuadro de texto que indica el título de la casilla y qué se espera que el usuario coloque como valor. Si se coloca un valor que no se encuentra entre el rango de valores de la casilla, aparece un mensaje de error, como aparece en la Figura 6, donde se indica al usuario que debe de chequear el valor ingresado en la casilla.

Figura 5. Muestra de descripción de casillas amarillas.

Cálculo Plato de Alimentación	
Variable	Valor
Carga inicial (L)	60.00
Concentración de carga inicial (%w/v)	15.0
Presión de vapor (psi)	2.1
Temperatura promedio de operación de la torre (°C)	77.0
Concentración de la alimentación (%w/v)	78.0

Cálculo Balance de Energía	
Variable	Va
Temperatura del laboratorio (°C)	24.0
Temperatura externa de la torre de platos (°C)	67.0
Flujo de agua de enfriamiento (L/min)	1.00
Temperatura de agua de entrada al condensador (°C)	19.00
Temperatura de agua de salida del condensador (°C)	21.00
Temperatura externa del condensador (°C)	58.00
Temperatura interna del calderín (°C)	89.00
Temperatura externa del calderín (°C)	74.00
Temperatura de condensados (°C)	80.00
Cantidad de condensados (L)	24.00
Tiempo de operación (h)	5.00

Volumen de Carga
 Ingresar el volumen de la solución inicial que se colocará en el calderín. El máximo de volumen es de 60 L. Colocar el valor en L.

Figura 6. Mensaje de error al colocar un valor fuera de rango en las casillas amarillas.

Cálculo Plato de Alimentación	
Variable	Valor
Carga inicial (L)	65
Concentración de carga inicial (%w/v)	15.0
Presión de vapor (psi)	2.1
Temperatura promedio de operación de la torre (°C)	77.0
Concentración de la alimentación (%w/v)	78.0

Cálculo Balance de Energía	
Variable	Va
Temperatura del laboratorio (°C)	24.0
Temperatura externa de la torre de platos (°C)	67.0
Flujo de agua de enfriamiento (L/min)	1.00
Temperatura de agua de entrada al condensador (°C)	19.00
Temperatura de agua de salida del condensador (°C)	21.00
Temperatura externa del condensador (°C)	58.00
Temperatura interna del calderín (°C)	89.00
Temperatura externa del calderín (°C)	74.00
Temperatura de condensados (°C)	80.00
Cantidad de condensados (L)	24.00
Tiempo de operación (h)	5.00

Volumen de Carga
 Ingresar el volumen de la solución inicial que se colocará en el calderín. El máximo de volumen es de 60 L. Colocar el valor

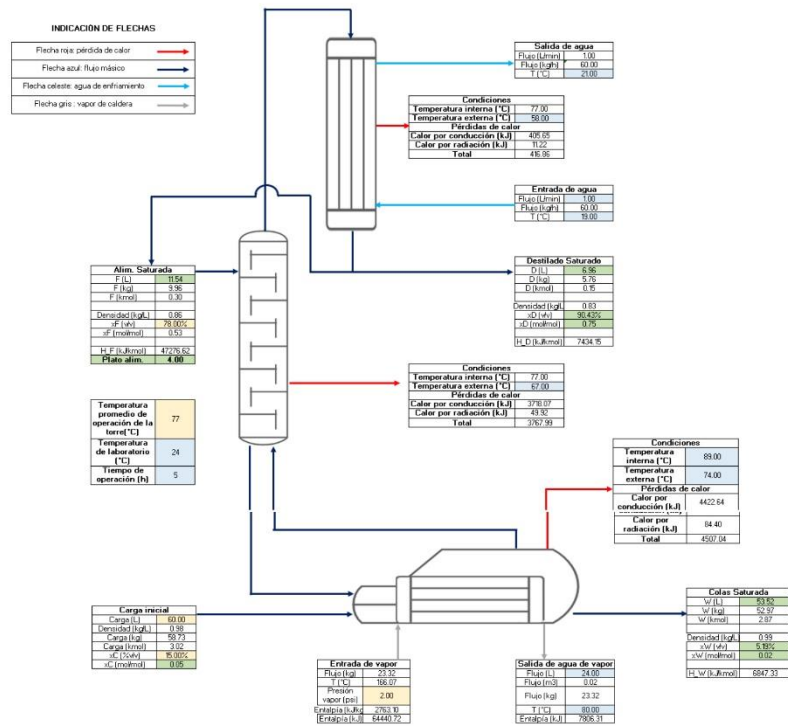
Valor incorrecto.
 Se ha colocado un valor que no se encuentra entre los límites de 0 y 60L.
 Reintentar Cancelar Ayuda

- Flecha roja: pérdida de calor
- Flecha azul: flujo másico
- Flecha celeste: agua de enfriamiento
- Flecha gris: vapor de caldera

Alim. Saturada

En la parte de la derecha, se presenta el diagrama de flujo de la Torre de Destilación con sus tres equipos: el Calderín, la torre de platos, y el Condensador. Cada uno tiene flechas de flujo másico de la solución, color azul oscuro, y de pérdida de calor, color rojo. El calderín tiene un par de flechas gris que indican el flujo del vapor de agua que proviene de la caldera, y el condensador tiene un par de flechas celestes que indican el flujo de agua de enfriamiento.

Figura 7. Diagrama de flujo de la Torre de Destilación con el Calderín, torre de platos y Condensador.



Cuadro 1. Valores que debe de ingresar el usuario.

Ubicación / Equipo	Nombre de variable experimental	Descripción	Límites
Generales	Temperatura del laboratorio (°C)	Temperatura del ambiente, es decir la temperatura del Laboratorio de Operaciones Unitarias.	Entre 0 °C y 40°C
	Tiempo de operación (h)	Tiempo en el que se utilizó la Torre de Destilación en términos de la entrada de vapor.	Mayor a 0 horas.
Calderín	Carga (L)	Volumen total de la carga al calderín.	Entre 0 L y 60 L.
	x _C (%v/v)	Concentración volumétrica porcentual de la carga.	Entre 0% y 93.5% (conc. Azeótropo)
	Presión de vapor (psi)	Presión de vapor que entra en la chaqueta del calderín.	Entre 0 y 6 psi.
	Flujo de condensados (L)	Volumen de condensados obtenidos en toda la operación.	Mayor a 0 L.
	Temperatura de condensados (°C)	Temperatura de condensados obtenidos en la operación.	Entre la temperatura del lab y la temperatura de sat. Del vapor.
Torre de platos	Temperatura promedio de operación de la torre (°C)	Temperatura interna promedio de los platos de la torre	Entre 70°C y 85°C.
	Temperatura externa (°C)	Torre externa de la superficie de la torre de platos.	Entre la del laboratorio y la interna de la torre.
	x _F (v/v)	Concentración volumétrica porcentual de alimentación.	Entre 0% y 100%
Condensador	Flujo (L/min)	Flujo de agua de enfriamiento	Mayor a 0 L/min
	Temperatura de agua de entrada (°C)	Temperatura de agua en la entrada del condensador (inferior)	Mayor a 0°C.
	Temperatura del agua de salida (°C)	Temperatura de agua en la salida del condensador (superior)	Mayor que la temperatura de entrada
	Temperatura externa (°C)	Temperatura externa de la superficie del condensador.	Mayor a 0°C.

La información experimental que debe colocar son temperaturas internas y externas de los equipos, flujo y temperatura de la salida y entrada de agua de enfriamiento en el condensador, temperatura de los condensados de vapor, la temperatura interna promedio de los platos y la concentración del primer destilado de la torre de Destilación. Cada uno de estos valores tiene su propia casilla con un mensaje sobre la información del valor que debe ingresar y las restricciones del mismo. En el Cuadro 1, se muestra una lista de los valores que se deben ingresar en el simulador. Al terminar de colocar los datos, el usuario puede dar click al botón “Calcular plato de alimentación” para obtener las concentraciones esperadas de destilados y colas, y el plato de alimentación.

Regresando a la primera sección de la hoja de “Operación de la Torre”, se muestran tres opciones que contienen cálculos previos que se realizaron para el buen funcionamiento del simulador y que el usuario puede visualizar. El botón de “Balance de Masa y Materia” muestra los balances globales de flujo y concentración molar de la solución inicial que se coloca en el calderín, los destilados y las colas. La opción de “Balance de Energía” muestra los flujos de energía de cada equipo, tanto del flujo de la solución como el de las pérdidas de calor hacia el ambiente, ya que el equipo no se encuentra aislado. Por último, el botón de “Determinación de Platos” muestra una gráfica con la determinación de los platos de operación, junto con la gráfica de equilibrio del sistema etanol-agua. En las siguientes secciones se presentará cada botón.

Figura 7. Opciones de visualización de cálculos previos en la hoja de “Operación de la Torre”.

Si desea observar un cálculo en específico, puede visitar cualquiera de estas hojas.

**Balance de Masa y
Materia**

Balance de Energía

**Determinación de
Platos**

1.1.1 Balance de Masa y Materia

Los balances de masa y materia se presentan en la hoja con el mismo nombre. Esta hoja tiene como propósito la visualización de cálculos, el usuario no puede cambiar o sustituir valores de esta. Como se puede observar en la Figura 8, del lado izquierdo se presentan las ecuaciones teóricas del sistema global, y del lado izquierdo se muestran los valores iniciales y finales de flujo y concentraciones molares del sistema.

Figura 8. Hoja de Balance de Masa y Materia

Menú Principal

Operación de la Torre

En esta sección se realiza el balance de masa y de materia de los flujos de carga, destilados y colas, ya que son los flujos de entrada y salida globales de todo el equipo.

Balance de masa y materia

Ecuaciones

(1) $C = D + W$

(2) $x_C * C = x_D * D + x_W * W$

Despejar D de (1) y reemplazar en (2)

(1.1) $D = C - W$

(3) $x_C * C = x_D * (C - W) + x_W * W$

Despejar W de (3)

(3) $\frac{(x_C - x_D) * C}{(x_W - x_D)} = W$

Consideraciones

No existen fugas en la torre destilación.

Concentraciones	
xC (mol/mol)	0.096080
xW (mol/mol)	0.008621
xD (mol/mol)	0.797424

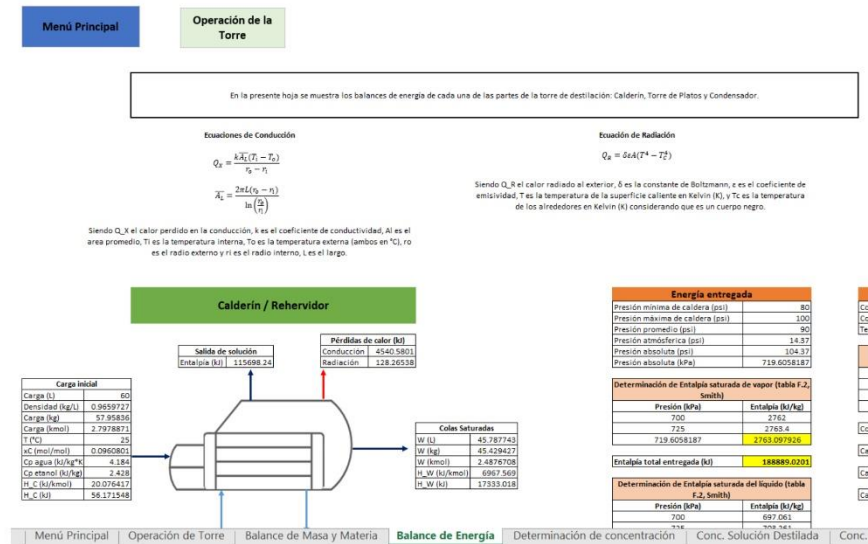
Flujos molares	
C (kmol)	2.797887
W (kmol)	2.487671
D (kmol)	0.310216

Menú Principal
Operación de Torre
Balance de Masa y Materia
Balance de Energía
Deter

1.1.2 Balance de Energía

En esta hoja, se muestran los Balances de Energía de los tres equipos de la Torre de Destilación: Calderín, torre de platos, y Condensador. En la Figura 9, se muestra que la parte superior de la hoja tiene las opciones de “Menú Principal” y de “Operación de la Torre” para que el usuario pueda regresar a alguna de estas hojas. También se muestra una pequeña descripción de la información presentada en la hoja y las ecuaciones de pérdida de energía por conducción y radiación. Cabe mencionar que el usuario tiene acceso a esta hoja para visualizar los cálculos de energía del sistema, por lo que el usuario no puede modificar o cambiar valores de esta hoja.

Figura 9. Hoja de Balance de Energía



Como se mencionó anteriormente, se realizó un balance de energía para cada parte de la Torre de Destilación. En cada sección, se muestran las tablas de cálculo de pérdida de calor por radiación y por conducción que se realizaron para cada equipo. En el caso del calderín, se muestran los cálculos de determinación de energía entregada por el vapor de la caldera y la energía que se eliminó en los condensados del calderín. Con respecto al condensador, se realizaron cálculos de la energía eliminada por medio del agua de enfriamiento. Los diagramas de cada uno de los equipos se muestran en las figuras 10, 11 y 12.

Figura 10. Balance de Energía del Calderín.

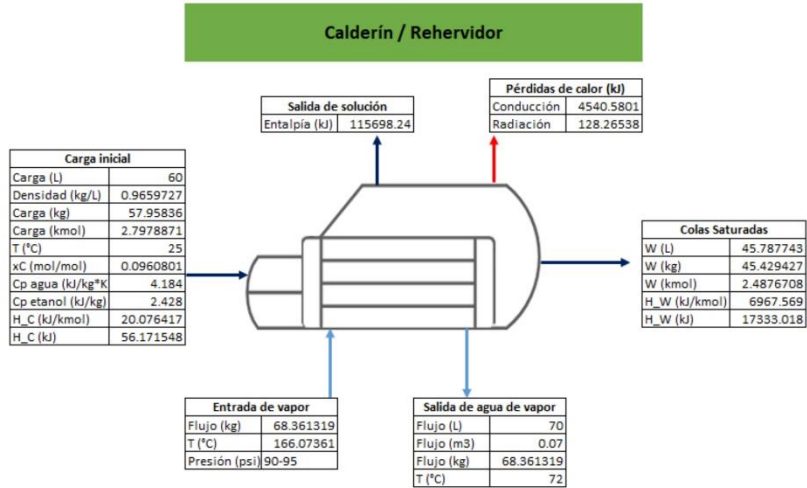


Figura 11. Balance de Energía de la torre de platos.

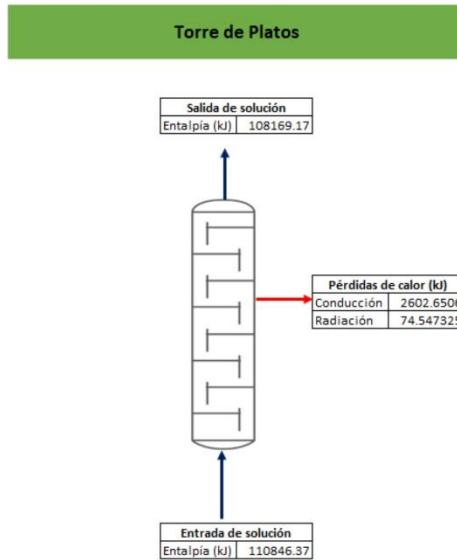
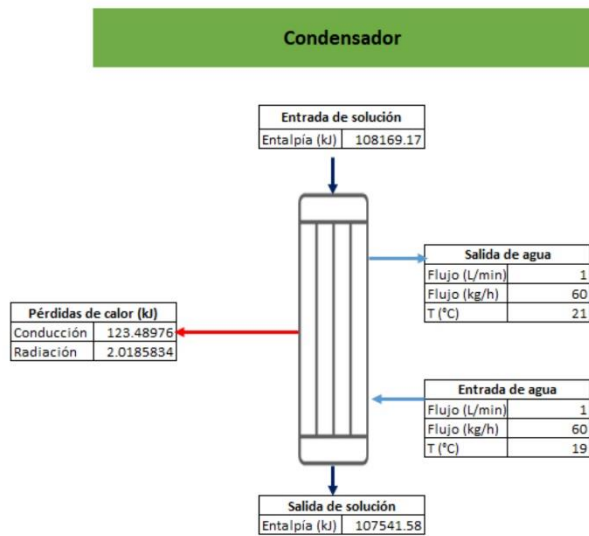


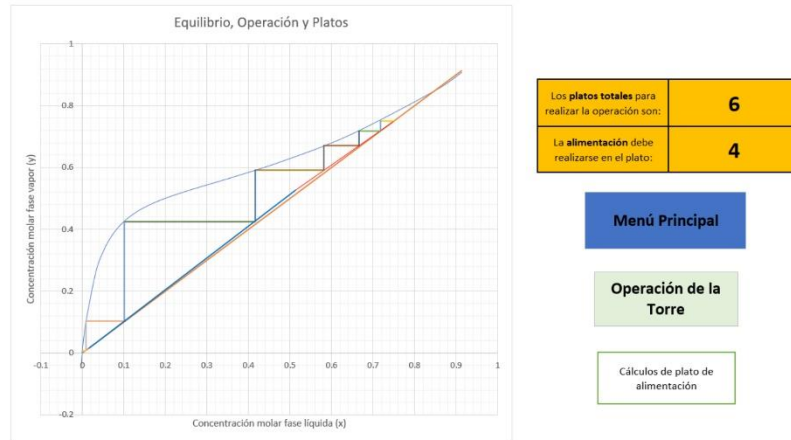
Figura 12. Balance de Energía del Condensador



1.1.3 Determinación de Platos

Una vez que el usuario haya seleccionado la opción de “Calcular el Plato de Alimentación”, la hoja de “Determinación de Platos” está lista para ser analizada. En esta hoja se muestra una vista general de la determinación de los platos de operación de la Torre de Destilación. Del lado izquierdo, se puede observar una gráfica que representa la curva de equilibrio, la curva de operación que es muy similar a la línea diagonal, y al dibujo de los platos. Del lado derecho, se presenta una pequeña tabla que indica el número de platos totales que requiere la operación y el número de plato de alimentación calculado de acuerdo a las condiciones iniciales. También, se encuentran otra serie de botones con los cuales el usuario puede interactuar. Los botones “Menú Principal” y “Operación de la Torre” dirigen al usuario de regreso a una de estas opciones. El último botón, titulado “Cálculos de Plato de Alimentación”, lleva al usuario a una hoja de cálculo que contiene todos los cálculos previos al plato óptimo de alimentación.

Figura 13. Hoja de Determinación de Platos.

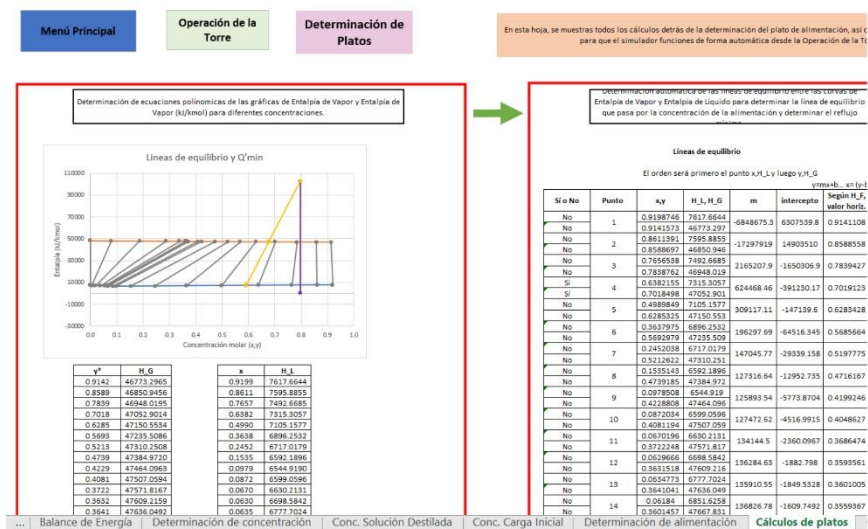


1.1.4 Cálculos de Plato de Alimentación

En la Figura 14, se puede visualizar una parte de los cálculos que se realizaron para la determinación del plato de alimentación. Cabe mencionar que esta hoja no debe ser manipulada por el usuario. Solamente se presenta para que el usuario pueda entender el funcionamiento del Simulador.

Como se puede visualizar, cada cálculo importante se divide en cuadros rojos, y el orden de los cuadros está determinado por flechas verdes. Cada uno de estos cálculos se realizaron para proveer la automatización del simulador. El primer cuadro rojo hace referencia a la definición de las gráficas de Entalpía de Gas, HG, y la Entalpía de Líquidos, HL. El siguiente cuadro rojo permite determinar los puntos teóricos entre los que se encuentra nuestro punto de alimentación, para seguir en el tercer cuadro rojo donde se determina la pendiente de la alimentación mínima y obtener el reflujo mínimo. Después de definir un factor para el reflujo mínimo y obtener el reflujo real de una operación batch, el siguiente cuadro rojo muestra la definición de las líneas guías para dibujar la gráfica de operación. Después, en el último cuadro rojo, se determina el dibujo de los platos y la indicación de los platos totales y el plato de alimentación.

Figura 14. Hoja de Cálculos de Platos.



1.2 Determinación de Concentración volumétrica y molar

El propósito de la siguiente hoja es otorgarle al usuario una forma fácil de determinar el porcentaje volumen/volumen de etanol a partir de una concentración molar o viceversa. Usualmente se inician operaciones con la determinación del porcentaje de concentración volumétrico, pero es importante que el usuario conozca las concentraciones molares, ya que estas se utilizan para la determinación de platos y el plato de alimentación. Como se muestra en la Figura 15, las casillas amarillas son las únicas con las que puede interactuar el usuario. Si se hace click sobre cada una de ellas, el simulador provee una breve descripción de lo que se debe colocar y los rangos. Esta hoja también tiene otras opciones, como un botón de regreso a “Menú Principal” o “Operación de la Torre”. Además, se presenta un botón para la sección de “Formulación de concentración de carga inicial a partir de varias soluciones”, la cual se explicará en los siguientes puntos.

Figura 15. Hoja de Determinación de Concentración Volumétrica y Molar.

Menú Principal

Operación de la Torre

Esta hoja tiene el objetivo de determinar la concentración molar y volumétrica de una muestra única.

A continuación se muestran dos tablas de conversiones. Utilice la tabla cuya conversión es la que necesita. Solamente debe colocar el valor que desea convertir en la casilla de color amarillo.

Para determinar la formulación de la carga inicial a diferentes volúmenes, seleccione uno de los siguientes botones.

Formulación de concentración de carga inicial a partir de varias soluciones

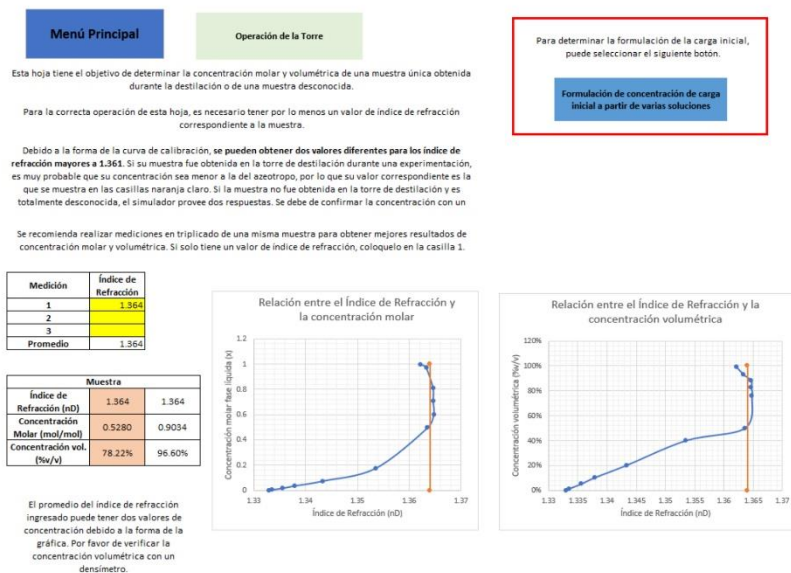
Concentración molar (mol/mol) a concentración volumétrica (%v/v)	
Concentración	Valor
Molar (mol/mol)	0.82
Volumétrica (%v/v)	99.8%

Concentración volumétrica (%v/v) a concentración molar (mol/mol)	
Concentración	Valor
Volumétrica (%v/v)	88%
Molar (mol/mol)	0.69877551

1.3 Determinación de la concentración a partir del índice de refracción

En la siguiente hoja, se presenta una herramienta para que el usuario pueda obtener la concentración de una muestra a partir de los valores de índice de refracción, n_D , obtenidos con el refractómetro. La forma en la que se debe utilizar el refractómetro se presenta en la sección IV, inciso 2. El usuario puede colocar en las casillas amarillas hasta tres lecturas de una misma muestra para obtener la concentración volumétrica y molar de la misma. Con la ayuda de esta hoja, el usuario podría determinar las concentraciones de las muestras obtenidas durante la corrida de la Torre de Destilación o de alguna muestra desconocida. Esta hoja también tiene otras opciones, como un botón de regreso a “Menú Principal” o “Operación de la Torre”. Además, se presenta un botón para la sección de “Formulación de concentración de carga inicial a partir de varias soluciones”, la cual se explicará a continuación.

Figura 16. Hoja de Determinación de la concentración a partir del índice de refracción.



1.4 Formulación de Concentración de carga inicial a partir de varias soluciones

En la presente hoja, se muestra una herramienta útil para el usuario para poder formular la carga inicial de solución que se coloca en el calderín a partir de varias soluciones. En la práctica, no es accesible tener etanol absoluto, por lo que la mayoría de las prácticas se parten de soluciones existentes que tienen diferentes volúmenes y concentraciones. En el lado izquierdo, se presenta una tabla con 10 filas en las que el usuario puede colocar las características de las soluciones que tiene disponible. Esta sección es automática en los cálculos, pero no en la determinación de volúmenes, por lo que el usuario tiene que modificar los valores hasta que se cumplan con las condiciones de solución inicial colocadas en un inicio.

En el lado derecho de la hoja, se muestra un cálculo teórico de 60 L de solución inicial que utiliza etanol absoluto para obtener la concentración deseada. Este cálculo es solamente permitido si el usuario tiene disponibilidad de etanol absoluto para realizar la solución inicial.

Figura 17. Hoja de Formulación de Concentración de carga inicial a partir de varias soluciones.

Menú Principal

Esta hoja tiene el objetivo de determinar la concentración de etanol de la carga inicial según las concentraciones iniciales de diferentes soluciones.

Primero debe de especificar el volumen y la concentración deseada en las casillas celestes.

Se presenta una tabla con 11 líneas disponibles que representan 10 soluciones disponibles y un volumen de agua que se tienen para realizar la solución de la carga inicial. Se debe de llenar por lo menos una línea, pero debe cumplir con el volumen y concentración esperada.

Colocar en las casillas amarillas los volúmenes y las concentraciones volumétricas de estas concentraciones.

Si no conoce la concentración volumétrica de una solución, la puede determinar por medio del densímetro o por medio del índice de refracción a través del siguiente botón.

Determinación de concentración a partir del índice de refracción

Volumen de solución (L)	60
Concentración deseada (%v/v)	25%

Para realizar una solución de carga utilizando solamente etanol absoluto para una base de 60 L.

Solución	Volumen (L)	Concentración volumétrica (%v/v)
1	15	25%
2	7	12%
3	10	15%
4	15	50%
5		
6		
7		
8		
9		
10		
Agua	13	0%
Solución de carga	60	22.650%

Concentración de etanol absoluto (v/v%)	100%
Volumen (L)	60
Concentración volumétrica esperada (v/v%)	15%
Volumen de etanol absoluto (L)	9.01

Con las soluciones descritas anteriormente, la solución final no tiene la concentración deseada de etanol.

... Balance de Energía | Determinación de concentración | Conc. Solución Destilada | **Conc. Carga Inicial** | Determinación

2. Demostración de Cálculos Previos adicionales

El resto de hojas dentro del Simulador contienen datos experimentales que son la base para el buen funcionamiento del simulador, entre ellas se puede mencionar el cálculo de las curvas de entalpía de gas y líquido, los datos de la curva de calibración de etanol agua, los datos del equilibrio de Vapor-Líquido del sistema etanol-agua, y densidades de agua a diferentes temperaturas.

IV. Guía de Operación

En esta sección, se muestran los procedimientos para la operación de la Torre de Destilación y el uso del Refractómetro.

1. Torre de Destilación

1. Colocar las condiciones de operación en el simulador y obtener le plato de alimentación.
2. Verificar que las válvulas del calderín, platos y condensador estén cerradas.
3. Verificar que la caldera y la torre de enfriamiento estén operando.
4. Verificar el nivel de líquido dentro del calderín.
 - a. Si el calderín contiene líquido:
 - i. Tomar una muestra en una probeta de 250 mL y medir la concentración utilizando un densímetro de etanol y refractómetro.
 - ii. Medir el volumen.
 - iii. Ajustar cálculos de alimentación inicial con el volumen actual dentro del calderín y el volumen adicional, para tener una solución total de 60 L de etanol y agua.
 - b. Si no contiene líquido, realizar una solución de 60 L de etanol y agua.
5. Abrir la válvula de alimentación del calderín.
6. Cargar la solución y cerrar la válvula de alimentación.
7. Abrir la válvula de vapor del calderín hasta alcanzar una presión de 3 psi.
8. Monitorear la presión de vapor para mantener las temperaturas constantes.
 - a. Un cambio en la presión puede ocasionar un aumento rápido de temperatura en la torre y afectar la concentración final del destilado.
9. Monitorear la temperatura del calderín y de los platos de la torre de destilación.
 - a. Si no hay un cambio de temperatura, se debe liberar presión en la parte superior del condensador.
10. Cuando la temperatura del último plato sea 40°C, encender el condensador.
11. Esperar hasta que la temperatura de los platos sea constante.

12. Cuando se obtenga condensado, abrir el plato de alimentación.
13. Operar a reflujo total.
14. Después de 30 minutos, tomar muestras de aproximadamente 10 mL en beakers de 50 mL y taparlos inmediatamente con Parafilm.
15. Colocar los beakers en un baño térmico de 20°C.
16. Determinar el índice de refracción de la muestra obtenida de cada plato, iniciando con el primer plato.
17. Repetir el paso 14 para cada muestra.
18. Repetir los pasos 13 al 16 tres veces más o hasta que la diferencia entre las concentraciones de cada plato sea menor o igual a 0.01.
19. Cerrar la válvula de reflujo y la del plato de alimentación
20. Abrir la válvula azul en la parte superior y la alimentación del plato 1.
21. Esperar unos tres minutos.
22. Abrir la válvula de destilados y recolectar 250 mL.
23. Determinar la concentración con un densímetro o con el refráctometro.
 - a. Si la concentración es cercana a 93% v/v, continuar recolectando el destilado hasta que la concentración bajé a 85%.
 - b. Si no, se debe de cerrar las válvulas y alimentar nuevamente al plato de alimentación (paso 12).
24. Tara una cubeta y colocarla en la válvula de descarga de destilado.
25. Abrir la válvula de destilados y recolectar el producto.
26. Cerrar la válvula y pesar la cubeta con destilados.
27. Tomar una muestra de 250 mL del volumen final y medir la concentración de etanol %v/v con un densímetro de etanol y con el refractómetro.
28. Cerrar la válvula de vapor.
29. Esperar hasta el día siguiente para medir el volumen del líquido en el calderín y su concentración con el refractómetro.
30. No descargar el calderín para la siguiente práctica.

2. Refractómetro

1. Encender el baño térmico y establecer la temperatura de 20°C.
2. Encender el refractómetro.
3. Realizar un blanco con agua destilada en el refractómetro y establecerlo como cero en el equipo.
4. Colocar una gota de la solución que desea analizar en el lente del refractómetro, esperar a que disminuya la temperatura hasta 20°C, y anotar el índice de refracción.
5. Limpiar el lente con un kimwipe. Limpiar con agua destilada si es necesario.
6. Hacer un triplicado de las concentraciones, si es necesario.
7. Realizar el procedimiento 4-6 con la siguiente muestra.
8. Limpiar el refractómetro con agua destilada y secar con un kimwipe.
9. Apagar el refractómetro y el baño térmico.

XII. GLOSARIO

Agotamiento: Es la parte inferior de la torre, a partir del plato de alimentación, y es donde se encuentra la mayor composición del componente menos volátil.

Calderín: Equipo en la parte inferior de la Torre de Destilación que calienta la carga inicial por medio de una chaqueta de vapor de la caldera.

Coefficiente de actividad: Relaciona la fugacidad real y la concentración de una solución. Por lo tanto, es importante determinar el coeficiente de actividad específico para el sistema para realizar los ajustes a la ecuación de la Ley de Raoult.

Condensador: Equipo en la parte superior de la Torre de Destilación que utiliza agua de enfriamiento para disminuir la temperatura de la fase de vapor que proviene de la Torre de Destilación.

Destilación: Método de separación de componentes de una solución, en base a su distribución entre una fase líquida y otra gaseosa.

Enriquecimiento: Es la parte superior de la torre, a partir del plato de alimentación, y es donde se encuentra la mayor composición del componente volátil.

Equilibrio vapor-líquido: Relación entre las concentraciones de la fase líquida y gas de una mezcla binaria.

Plato de alimentación: Plato de la torre al cual se alimenta el destilado y permite aumentar la concentración del destilado final:

Ponchon & Savarit: Método de dimensionamiento de torres de destilación que utiliza la entalpía de las fases líquido y gas para determinar el número de platos y el plato de alimentación.

Simulador: Programa digital que permite facilitar cálculos y simular procesos por medio de el ingreso de datos iniciales.

Torre de Destilación: Equipo utilizado en el proceso de destilación y se compone de un rehervidor o calderín, torre de platos y un condensador.

Torre de Enfriamiento: Equipo auxiliar que se utiliza para proveer agua de enfriamiento para el condensador de la Torre de Destilación.

Transferencia de calor: Proceso por el que transfiere energía térmica entre un cuerpo a otro.

Vapor saturado: Vapor que se encuentra en la temperatura de saturación.