

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Facultad de Ingeniería



Elaboración de una hoja de cálculo en línea que permita resolver una columna de destilación fraccionada, mediante el método de McCabe-Thiele, para diferentes sistemas vapor-líquido como herramienta en el Laboratorio de Operaciones Unitarias

Trabajo de graduación presentado por  
Abigail María Xutuc Monroy  
para optar al grado académico de Licenciada en Ingeniería Química

Guatemala  
2017



Elaboración de una hoja de cálculo en línea que permita resolver una columna de destilación fraccionada, mediante el método de McCabe-Thiele, para diferentes sistemas vapor-líquido como herramienta en el Laboratorio de Operaciones Unitarias

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Facultad de Ingeniería



Elaboración de una hoja de cálculo en línea que permita resolver una columna de destilación fraccionada, mediante el método de McCabe-Thiele, para diferentes sistemas vapor-líquido como herramienta en el Laboratorio de Operaciones Unitarias

Trabajo de graduación presentado por  
Abigail María Xutuc Monroy  
para optar al grado académico de Licenciada en Ingeniería Química

Guatemala  
2017

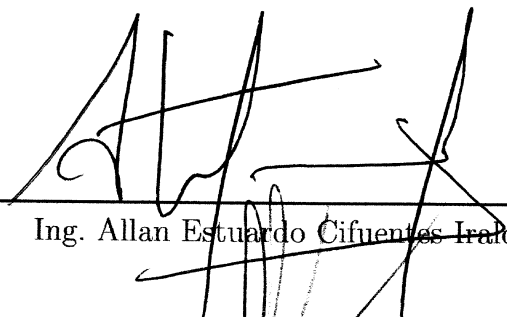
Vo.Bo.:



---

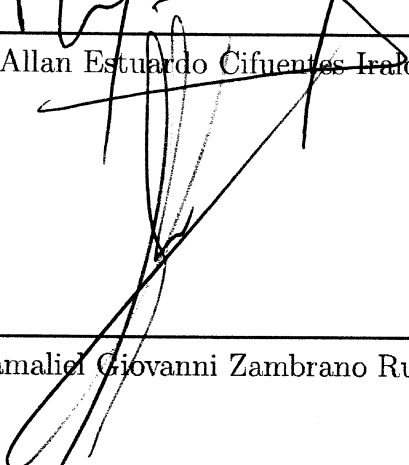
Ing. Allan Estuardo Cifuentes Iralda

Tribunal examinador:



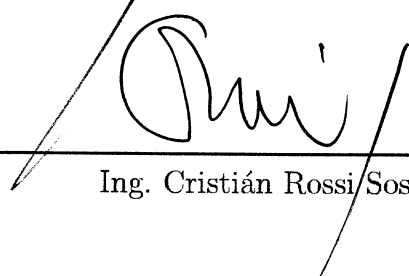
---

Ing. Allan Estuardo Cifuentes Iralda



---

Ing. Gamaliel Giovanni Zambrano Ruano



---

Ing. Cristián Rossi Sosa

Fecha de aprobación: Guatemala, 29 de noviembre del 2017

## PREFACIO

La elaboración del presente trabajo de graduación ha sido un trabajo, no exento de dificultades, pero altamente satisfactorio principalmente por la cantidad de aprendizajes obtenidos durante el proceso. Requirió en muchos casos recordar conceptos y procedimientos aprendidos desde los primeros años de universidad, así como pulir habilidades que durante la carrera no había podido desarrollar más allá de lo solicitado por algunos cursos y proyectos. Una de estas habilidades ha sido el uso de las hojas de cálculo, tan usadas en todos los cursos, y cuyo potencial he podido utilizar mejor al realizar este trabajo. Muchas de las funciones presentes en las hojas de cálculo eran desconocidas para mí, exceptuando por las funciones estadísticas y matemáticas utilizadas usualmente. Aquellas funciones de análisis de datos, de manipulación de información y de lógica han resultado, sin embargo, tan indispensables para lograr el objetivo planteado que he quedado sorprendida con los resultados y las ventajas que dichas funciones representan.

Aunque el corazón de este trabajo de graduación parece sencillo, *El método de McCabe-Thiele*, elaborar este trabajo ha resultado un proceso tan iluminador en el sentido de que me ha permitido capturar la esencia de algunos conceptos cuyo conocimiento había obtenido durante el curso de Transferencia de Masa únicamente de manera parcial, según lo permite el tiempo disponible para el tema. Me ha permitido ser consciente del hecho de que cada línea en el diagrama de McCabe-Thiele tiene un significado físico, tangible y visualizable, y de que ningún paso de los que se realizan es trivial. Me permitió, por lo mismo, comprender cabalmente la genialidad del método al poder plasmar en un solo diagrama la esencia de esta operación unitaria tan importante y la gran relevancia que tiene las matemáticas para que tal cosa sea posible. En el aspecto experimental, pude poner en práctica aquellos conocimientos adquiridos durante la carrera y adquirir muchos otros, tanto desde el punto de vista conceptual como desde el aspecto procedimental y de la seguridad industrial.

Es importante mencionar que la realización de este trabajo no habría sido posible sin la intervención de personas que, cercanas o lejanas a mí, han sido un gran apoyo de manera consciente o sin saberlo. Mis agradecimientos a Dios van más allá de lo que pueda expresar en un par de líneas sencillamente porque Él, en quien creo decididamente, está por encima de todo y me ha ayudado a comprender una parte minúscula del universo que Él ha realizado y del cual somos parte. Por ello le agradezco constantemente la formación conceptual y procedimental que me ha permitido obtener, tanto a nivel académico al completar esta carrera, como por fuera de la academia, formación que seguiré adelante completando otras metas aún por cumplir.

Quiero agradecer también a mi asesor, el Ing. Allan Cifuentes, por todo el apoyo brindado, los comentarios y las revisiones realizadas así como por los lineamientos que me brindo ya que los resultados de este trabajo serán utilizados en su curso. Siempre estuvo dispuesto a resolver las dudas que surgieron y estuvo muy atento a los avances realizados. Agradezco enormemente que haya apartado tiempo entre sus clases y su trabajo para realizar las revisiones necesarias. Tengo también un agradecimiento profundo con el Ing. Gamaliel Zambrano, director de Ingeniería Química y a quien considero también mi segundo asesor ya que estuvo apoyándome desde mucho antes de iniciar este trabajo. Agradezco inmensamente el apoyo que me dio en todas las gestiones que fueron necesarias previamente al semestre que cursé en Canadá, en la Universidad de Saskatchewan, como parte de estos cinco años de formación. El Ing. Zambrano estuvo dispuesto desde el principio para apoyarme en la

elección y aprobación de los cursos a completar en dicha universidad y en su posterior convalidación. En la realización del presente trabajo de graduación, agradezco su apoyo y su guía durante las experimentaciones en el Laboratorio de Operaciones Unitarias así como sus comentarios y correcciones.

En el Laboratorio de Operaciones Unitarias también agradezco mucho, a Moisés Vásquez especialmente, y también a Cristian García porque en cada experimentación me brindaban muchísimo apoyo en el encendido de los sistemas auxiliares así como en la manipulación de la Columna de Destilación y me transmitieron mucho de su experiencia con los equipos utilizados. Estaban siempre dispuestos a dedicar tiempo para apoyarme a pesar de toda su carga laboral. Agradezco también al Ing. Cristián Rossi, encargado del Laboratorio de Operaciones Unitarias y catedrático de quien aprendí muchísimo en los cursos que me impartió, desde el primer año, por los comentarios acertados que recibí en los momentos que estuvo a su alcance revisar este trabajo y supervisar la experimentación que estuve realizando. Por supuesto, debo un inmenso agradecimiento a Verónica Jimenez a quien he podido acudir, con dudas sobre gestiones, o simplemente un poco de conversación, sin dejar de ser siempre bien recibida.

Estoy muy agradecida con el Ing. Jaime Rosales y el Ing. Jorge Luis Muñoz por la confianza que me brindaron al permitirme ser auxiliar en sus cursos, también por los buenos comentarios sobre los proyectos que realizamos en sus clases y también las revisiones a este trabajo. Agradezco que ambos siempre me apoyaron y me animaron a dar lo mejor de mí, así como a ir mucho más allá de lo esperado. Agradezco también a otros catedráticos, que quizás no tuvieron influencia directa en este trabajo, pero sí una influencia trascendental en mi carrera a lo largo de estos años. Entre ellos se encuentran M.A. Magda Moscoso y el Ldo. Luis Mijangos a quienes agradezco la oportunidad de haber sido su auxiliar, el Ldo. José Carlos Chiquín a quién acudí en más de una ocasión durante estos cinco años, y de quien siempre recibí valioso consejo. También a la Lda. Aída Fernandez, al Ing. Esgrid Sikahall y finalmente el Ldo. Pedro Luis Alonso, quien ha sido director del Instituto Guatemalteco de Cultura Hispánica y con quién recibí el curso de Historia de Guatemala Contemporánea, el cual ha sido decisivo para mí en muchos aspectos. A la Lda. Silvia Ciudad-Real de Buratti le agradezco su apoyo en la recta final de la elaboración de este trabajo. Agradezco, también, a la Lda. Luna Mishaan por sus y a la Lda. Xiomara Juárez por sus comentarios y por el aprecio que me demostraron siempre.

Agradezco ahora a mis padres: Ana María Monroy, quien nunca dudó de mí, fue mi apoyo principal, mi ejemplo, mi motivación y cada día de estos años me impulsó a dar lo mejor y a aprender con detalle y dedicación todo el conocimiento que iba adquiriendo; y Fernando Xutuc por ser también gran padre y maestro, así como por brindarme ejemplo de esfuerzo y compromiso. Agradezco también a mi hermano, Daniel Xutuc, a quien he admirado siempre por su entusiasmo y bondad, así como por sus habilidades en áreas más tecnológicas. En más de un proyecto durante estos años me apoyó con su creatividad y habilidades, y el resultado en cada ocasión fue muy superior debido a este elemento diferenciador. Quiero agradecer Luisa Granados y Emma Abac en quienes pude apoyarme en muchísimas ocasiones y con quienes compartimos muchos momentos de estudio y tensión académica así como de sosiego y recreación. Finalmente agradezco a la Universidad del Valle de Guatemala, institución en la que tuve el privilegio de completar esta etapa tan decisiva en mi vida y que me apoyó a través de la Fundación de la Universidad del Valle de Guatemala a realizar este sueño. Puedo decir con satisfacción que en esta institución obtuve una educación integral que me ha preparado como un buen elemento para el desarrollo de este bondadoso y enigmático país, Guatemala.

# CONTENIDO

<b>PREFACIO</b>	<b>v</b>
<b>CONTENIDO</b>	<b>vii</b>
<b>LISTA DE CUADROS</b>	<b>x</b>
<b>LISTA DE FIGURAS</b>	<b>xii</b>
<b>RESUMEN</b>	<b>xv</b>
<b>ABSTRACT</b>	<b>xvi</b>
<b>I INTRODUCCIÓN</b>	<b>1</b>
<b>II OBJETIVOS</b>	<b>3</b>
A Objetivo general . . . . .	3
B Objetivos específicos . . . . .	3
<b>III JUSTIFICACIÓN</b>	<b>4</b>
<b>IV MARCO TEÓRICO</b>	<b>5</b>
A Destilación . . . . .	5
1 Generalidades . . . . .	5
2 Equilibrio líquido y vapor de sistemas binarios . . . . .	5
3 Composiciones masa y mol . . . . .	9
4 Cálculo de entalpías . . . . .	10
5 Tipos de destilación . . . . .	12
6 Destilación fraccionada . . . . .	13
7 Método de McCabe-Thiele . . . . .	17
8 Equipo para destilación fraccionada . . . . .	27
B Uso de hojas de cálculo . . . . .	31
1 Hojas de cálculo de Google . . . . .	31
2 Gráficos en una hoja de cálculo de Google . . . . .	31
<b>V ANTECEDENTES</b>	<b>33</b>
A <i>Shortcut Distillation Calculations Via Spreadsheets</i> . . . . .	33
B <i>Visualizing the McCabe-Thiele Diagram</i> . . . . .	34
C <i>Hoja de cálculo en Excel para destilación binaria</i> . . . . .	35
D <i>CheCalc: Herramienta en línea</i> . . . . .	36
E <i>CheSheets: Hoja de cálculo en línea</i> . . . . .	37
F <i>MCTH - Número de platos teóricos McCabe-Thiele</i> . . . . .	38
<b>VI METODOLOGÍA</b>	<b>39</b>
A Cálculo de los datos de equilibrio líquido-vapor . . . . .	39

B	Configuración del Método McCabe-Thiele . . . . .	39
C	Experimentación en el Laboratorio de Operaciones Unitarias . . . . .	41
<b>VII</b>	<b>RESULTADOS</b>	<b>42</b>
A	Equilibrios líquido-vapor . . . . .	42
1	Hoja de cálculo . . . . .	42
2	Resultados de la hoja de cálculo . . . . .	46
3	Acceso a la hoja de cálculo . . . . .	46
B	Método McCabe-Thiele . . . . .	47
1	Hoja de cálculo . . . . .	47
2	Resultados de la hoja de cálculo . . . . .	53
3	Acceso a la hoja de cálculo . . . . .	53
4	Tablas de comparación de resultados . . . . .	54
C	Experimentación realizada en el Laboratorio de Operaciones Unitarias . . . . .	55
<b>VIII</b>	<b>DISCUSIÓN DE RESULTADOS</b>	<b>58</b>
<b>IX</b>	<b>CONCLUSIONES</b>	<b>65</b>
<b>X</b>	<b>RECOMENDACIONES</b>	<b>66</b>
<b>XI</b>	<b>BIBLIOGRAFÍA</b>	<b>67</b>
<b>XII</b>	<b>NOMENCLATURA Y GLOSARIO</b>	<b>68</b>
A	Nomenclatura . . . . .	68
B	Glosario . . . . .	69
<b>XIII</b>	<b>ANEXO 1: DESARROLLO DE LA HOJA DE CÁLCULO</b>	<b>70</b>
A	Procedimiento detallado para la elaboración del simulador . . . . .	70
1	Hoja de cálculo para la determinación del equilibrio . . . . .	71
2	Base de datos . . . . .	80
3	Ingreso de datos del usuario . . . . .	84
4	Líneas de tendencia . . . . .	86
5	Resolución de McCabe-Thiele . . . . .	111
6	Rangos con nombre en la hoja de cálculo . . . . .	132
B	Manual de usuario del simulador . . . . .	135
C	Comparación de un problema resuelto con el simulador y manualmente . . . . .	138
1	Problema resuelto con el simulador . . . . .	138
2	Problema resuelto manualmente . . . . .	149
<b>XIV</b>	<b>ANEXO 2: FUNCIONES UTILIZADAS</b>	<b>159</b>
A	Analizador . . . . .	159
B	Búsqueda . . . . .	160
C	Estadística . . . . .	163
D	Google . . . . .	164
E	Información . . . . .	165
F	Lógica . . . . .	166
G	Matemáticas . . . . .	168
H	Matriz . . . . .	170
I	Texto . . . . .	171
<b>XV</b>	<b>ANEXO 3: EXPERIMENTACIÓN</b>	<b>172</b>
A	Procedimientos realizados para la experimentación en el Laboratorio de Operaciones Unitarias . . . . .	172
1	Procedimientos importantes para a la experimentación . . . . .	172

2	Realización de una corrida de destilación . . . . .	174
3	Toma de muestras de líquido . . . . .	176
4	Medición de flujo de condensados . . . . .	177
5	Análisis de muestras por refractometría . . . . .	177
B	Materiales, cristalería, equipo y reactivos . . . . .	178
1	Materiales . . . . .	178
2	Cristalería . . . . .	178
3	Equipo . . . . .	178
4	Reactivos . . . . .	178
C	Datos originales . . . . .	183
1	Destilaciones metanol-agua . . . . .	183
2	Destilaciones etanol-agua . . . . .	187
3	Cuadros de los índices de refracción de soluciones alcohol-agua . . . . .	193
D	Cálculos de muestra . . . . .	196
1	Cálculo de concentraciones . . . . .	196
2	Cálculo de la eficiencia de los platos . . . . .	197
3	Diagramas de McCabe-Thiele a partir de los valores obtenidos . . . . .	198
4	Eficiencia del líquido según el simulador . . . . .	200
5	Cargas térmicas en la columna . . . . .	202
6	Balance de masa y energía . . . . .	203
E	Diagrama de flujo . . . . .	204
F	Datos calculados . . . . .	205
1	Concentraciones de obtenidas durante las destilaciones . . . . .	205
2	Eficiencia de los platos . . . . .	210
3	Diagrama de McCabe-Thiele para cada destilación realizada . . . . .	212
4	Eficiencia del líquido según la hoja desarrollada . . . . .	215
5	Balance de masa y energía . . . . .	216
<b>XVI</b>	<b>ANEXO 4: PLANOS Y DIAGRAMAS</b>	<b>219</b>
A	Planos de la columna de destilación . . . . .	219
B	Planos de los platos de la columna de destilación . . . . .	226
C	Diagrama de tuberías e instrumentación (P&ID) de la columna de destilación . . . . .	233

## LISTA DE CUADROS

<b>IV</b>	<b>MARCO TEÓRICO</b>	
IV.1	Constantes de Antoine y de Van Laar para varios sistemas . . . . .	8
IV.2	Constantes para calcular la capacidad calorífica y el calor latente de varias sustancias líquidas . . . . .	11
<b>VII</b>	<b>RESULTADOS</b>	
VII.1	Sistemas binarios presentes en el simulador . . . . .	42
VII.2	Elementos que puede visualizar y obtener en la simulación del equilibrio . . . .	46
VII.3	Resultados brindados por la hoja de cálculo para el método McCabe-Thiele . .	53
VII.4	Comparación de resultados entre el simulador y la resolución manual . . . . .	54
VII.5	Resultados de las destilaciones realizadas aplicadas al simulador . . . . .	55
<b>XIII</b>	<b>ANEXO 1: DESARROLLO DE LA HOJA DE CÁLCULO</b>	
XIII.1	Estadísticas de regresión de la función ESTIMACION.LINEAL() . . . . .	87
XIII.2	Rangos con nombre asignado en la hoja de cálculo . . . . .	132
XIII.3	Rangos con nombre asignado en la hoja de cálculo (continuación) . . . . .	133
XIII.4	Rangos con nombre asignado en la hoja de cálculo (final) . . . . .	134
XIII.5	Datos de equilibrio dados por el problema . . . . .	138
XIII.6	Datos de equilibrio completados para tener 21 concentraciones . . . . .	139
XIII.7	Datos para el cálculo de $\mu$ . . . . .	148
XIII.8	Datos para interpolación de $x_F$ . . . . .	151
XIII.9	Datos para interpolación de $x_D$ . . . . .	151
XIII.10	Datos para interpolación de $x_W$ . . . . .	151
<b>XV</b>	<b>ANEXO 3: EXPERIMENTACIÓN</b>	
XV.1	Cristalería volumétrica . . . . .	178
XV.2	Equipo . . . . .	179
XV.3	Información de los reactivos utilizados . . . . .	182
XV.4	Condiciones de operación durante las destilaciones metanol-agua . . . . .	183
XV.5	Índice de refracción del líquido en los platos - MetOH 1 . . . . .	184
XV.6	Índice de refracción de la alimentación - MetOH 1 . . . . .	184
XV.7	Medición de condensados - MetOH 1 . . . . .	184
XV.8	Índice de refracción del líquido en los platos - MetOH 2 . . . . .	185
XV.9	Índice de refracción de la alimentación - MetOH 2 . . . . .	185
XV.10	Medición de condensados - MetOH 2 . . . . .	185
XV.11	Índice de refracción del líquido en los platos - EtOH 1 . . . . .	187
XV.12	Índice de refracción de la alimentación - EtOH 1 . . . . .	187
XV.13	Medición de condensados - EtOH 1 . . . . .	187
XV.14	Índice de refracción del líquido en los platos - EtOH 2 . . . . .	188

XV.15	Índice de refracción de la alimentación - EtOH 2 . . . . .	188
XV.16	Medición de condensados - EtOH 2 . . . . .	188
XV.17	Índice de refracción del líquido en los platos - EtOH 3 . . . . .	188
XV.18	Índice de refracción de la alimentación - EtOH 3 . . . . .	189
XV.19	Medición de condensados - EtOH 3 . . . . .	189
XV.20	Duración de las corridas después de estabilizar la columna de destilación . . .	189
XV.21	Volumen de solución utilizado durante cada corrida . . . . .	189
XV.22	Flujo de agua proveniente de la torre de enfriamiento . . . . .	189
XV.23	Condiciones de operación durante las destilaciones etanol-agua . . . . .	191
XV.24	Índice de refracción a varias concentraciones de una solución metanol-agua . .	193
XV.25	Índice de refracción a varias concentraciones de una solución etanol-agua . . .	194
XV.26	Concentración de la solución alimentada EtOH 3 . . . . .	196
XV.27	Porcentaje de etanol en cada plato - EtOH 3 . . . . .	197
XV.28	Eficiencia de los platos - EtOH 3, Toma A . . . . .	197
XV.29	Curva de equilibrio etanol-agua y diagonal de 45° . . . . .	198
XV.30	Valores para graficar la escalera de la operación realizada . . . . .	199
XV.31	Valores para graficar el pseudoequilibrio . . . . .	199
XV.32	Concentraciones ( $x$ ) de las tomas realizadas en la destilación MetOH 1 . . . . .	205
XV.33	Concentraciones ( $x$ ) de las tomas realizadas en la destilación MetOH 2 . . . . .	205
XV.34	Concentraciones ( $x$ ) de las tomas realizadas en la destilación EtOH 1 . . . . .	206
XV.35	Concentraciones ( $x$ ) de las tomas realizadas en la destilación EtOH 2 . . . . .	207
XV.36	Concentraciones ( $x$ ) de las tomas realizadas en la destilación EtOH 3 . . . . .	207
XV.37	Concentraciones de acuerdo a las temperaturas de los platos . . . . .	209
XV.38	Eficiencia del líquido en los platos - MetOH 1 . . . . .	210
XV.39	Eficiencia del líquido en los platos - MetOH 2 . . . . .	210
XV.40	Eficiencia del líquido en los platos - EtOH 1 . . . . .	211
XV.41	Eficiencia del líquido en los platos - EtOH 2 . . . . .	211
XV.42	Eficiencia del líquido en los platos - EtOH 3 . . . . .	211
XV.43	Datos para los gráficos McCabe-Thiele de las destilaciones metanol-agua . . .	214
XV.44	Datos para los gráficos McCabe-Thiele de las destilaciones etanol-agua . . . .	214
XV.45	Resumen de las concentraciones de alimentación . . . . .	215
XV.46	Resumen de las concentraciones de destilado . . . . .	215
XV.47	Resumen de las concentraciones de residuo . . . . .	215
XV.48	Eficiencia del líquido de acuerdo al simulador . . . . .	215
XV.49	Flujo de vapor condensado, destilaciones metanol-agua . . . . .	216
XV.50	Flujo de vapor condensado, destilaciones etanol-agua . . . . .	216
XV.51	Flujo de agua fría en el condensador . . . . .	216
XV.52	Carga térmica del condensador para las destilaciones metanol-agua . . . . .	217
XV.53	Carga térmica del rehervidor para las destilaciones metanol-agua . . . . .	217
XV.54	Carga térmica del condensador para las destilaciones etanol-agua . . . . .	217
XV.55	Carga térmica del rehervidor para las destilaciones etanol-agua . . . . .	218
XV.56	Cantidad de solución inicial en cada destilación . . . . .	218

## XVI ANEXO 4: PLANOS Y DIAGRAMAS

XVI.1	Instrumentación de la columna de destilación . . . . .	233
XVI.2	Válvulas de la columna de destilación . . . . .	234

## LISTA DE FIGURAS

### IV MARCO TEÓRICO

IV.1	Equilibrio líquido-vapor a presión contante . . . . .	9
IV.2	Destilación simple en operación por lotes . . . . .	12
IV.3	Destilación continua . . . . .	13
IV.4	Destilaciones simples consecutivas . . . . .	13
IV.5	Entornos para balances de materia y energía . . . . .	16
IV.6	Balances del método McCabe-Thiele . . . . .	21
IV.7	Localización de la etapa de alimentación . . . . .	22
IV.8	Número de etapas mínimas para una columna operando en reflujo total . . . .	23
IV.9	Casos para reflujo mínimo . . . . .	23
IV.10	Efecto de la relación de reflujo $R$ en los costos de separación . . . . .	24
IV.11	Procedimiento general para McCabe-Thiele . . . . .	25
IV.12	Eficiencia de Murphree . . . . .	26
IV.13	Esquema de los flujos en el interior de una columna de platos . . . . .	27
IV.14	Platos perforados . . . . .	29
IV.15	Platos de campanas de burbujeo . . . . .	29
IV.16	Platos de válvulas móviles . . . . .	30
IV.17	Partes estructurales de una columna de platos . . . . .	30
IV.18	Vista de una hoja de cálculo de Google . . . . .	32
IV.19	Insertar un gráfico en una hoja de cálculo de Google . . . . .	32

### V ANTECEDENTES

V.1	Captura de pantalla de la primera página del artículo . . . . .	33
V.2	Captura de pantalla del artículo . . . . .	34
V.3	Hoja de cálculo para destilación binaria . . . . .	35
V.4	Captura de la herramienta McCabe-Thiele del sitio CheCalc . . . . .	36
V.5	Hoja de cálculo de Google en donde se resuelve un diagrama de McCabe-Thiele	37
V.6	Captura del programa MCTH de VaxaSoftware . . . . .	38

### VII RESULTADOS

VII.1	Vista general de la hoja configurada para calcular los datos de equilibrio líquido-vapor . . . . .	43
VII.2	Detalle del ingreso de datos para calcular los datos de equilibrio líquido-vapor	44
VII.3	Detalle del cuadro en el que se obtiene el equilibrio líquido-vapor . . . . .	45
VII.4	Código QR para ingreso al simulador . . . . .	46
VII.5	Vista general de la hoja para resolución de sistemas binarios mediante McCabe-Thiele . . . . .	47
VII.6	Detalle del ingreso de datos para resolución mediante McCabe-Thiele . . . . .	48
VII.7	Detalle de los datos importantes para el método McCabe-Thiele . . . . .	49
VII.8	Detalle de la especificación de las corrientes en la hoja de McCabe-Thiele . . .	50

VII.9	Detalle de la resolución gráfica realizada mediante McCabe-Thiele . . . . .	51
VII.10	Detalle del balance de masa y energía brindado por la hoja desarrollada . . . .	52
VII.11	EtOH 1, simulación de la operación con reflujo total a 0.978 atm. . . . .	55
VII.12	Simulación de la operación con reflujo total a 0.978 atm. Destilaciones metanol-agua. . . . .	56
VII.13	Simulación de la operación con reflujo total a 0.978 atm. Destilaciones etanol-agua. . . . .	57

### XIII ANEXO 1: DESARROLLO DE LA HOJA DE CÁLCULO

XIII.1	Lista desplegable de los sistemas disponibles . . . . .	71
XIII.2	Cuadros de datos para varios sistemas, útiles para el cálculo del equilibrio . . .	72
XIII.3	Cuadros de datos para varios sistemas, útiles para el cálculo del equilibrio (continuación) . . . . .	73
XIII.4	Primera captura de pantalla de la hoja en la que se realizará el cálculo de los valores de equilibrio para el sistema elegido . . . . .	75
XIII.5	Segunda captura de pantalla de la hoja en la que se realizará el cálculo de los valores de equilibrio para el sistema elegido . . . . .	76
XIII.6	Complemento Solver utilizado en conjunto con la hoja de cálculo . . . . .	79
XIII.7	Captura de pantalla de la base de datos con valores de equilibrio . . . . .	81
XIII.8	Captura de pantalla de la base de datos con valores de equilibrio de varios sistemas a 1 atm . . . . .	82
XIII.9	Captura de pantalla de la base de datos con valores de equilibrio de varios sistemas a 0.978 atm . . . . .	83
XIII.10	Sitio web VLE-Calc para obtener datos de equilibrio . . . . .	84
XIII.11	Captura de pantalla de la hoja en la cual el usuario puede añadir datos de equilibrio para trabajar un sistema binario personalizado . . . . .	85
XIII.12	Datos del equilibrio - Hoja <i>Líneas de tendencia</i> . . . . .	88
XIII.13	Cálculo de la línea de tendencia $T(K)$ vs. $x$ . . . . .	89
XIII.14	Cálculo de la línea de tendencia $y$ vs. $x$ . . . . .	90
XIII.15	Gráfica de los datos $y$ vs. $x$ y $x$ vs. $y$ para el sistema tetrahidrofurano-agua a 1 atm . . . . .	91
XIII.16	Prueba de la recta vertical . . . . .	91
XIII.17	Explicación del proceso de interpolación . . . . .	93
XIII.18	Datos para interpolación y graficación . . . . .	96
XIII.19	Cuadro para relleno de fórmulas . . . . .	101
XIII.20	Datos para graficar las curvas de operación del método McCabe-Thiele . . . .	102
XIII.21	Datos para graficar las etapas reales en escalera . . . . .	107
XIII.22	Datos para graficar el pseudoequilibrio . . . . .	110
XIII.23	Lista desplegable para elegir las unidades de concentración . . . . .	111
XIII.24	Lista desplegable para elegir el tipo de alimentación . . . . .	112
XIII.25	Ingreso de datos en la de resolución de McCabe-Thiele . . . . .	113
XIII.26	Datos del equilibrio importados y cálculo de $C_p$ y $\lambda$ . . . . .	116
XIII.27	Especificaciones de las corrientes en el sistema usando rehervidor . . . . .	119
XIII.28	Especificaciones de las corrientes en el sistema usando vapor vivo . . . . .	120
XIII.29	Interacción con el gráfico de la hoja de cálculo . . . . .	122
XIII.30	Línea de operación de enriquecimiento para $R_m$ . . . . .	123
XIII.31	Opciones finales para la resolución del sistema y gráfica de la operación . . . .	125
XIII.32	Resultados del balance de masa, materia y energía . . . . .	130
XIII.33	Diagrama de una columna de destilación con las concentraciones de las corrientes respectivas . . . . .	131
XIII.34	Códigos QR de acceso a los manuales . . . . .	135
XIII.35	Datos del sistema ingresados para la resolución del problema . . . . .	140
XIII.36	Hoja de cálculo en blanco para iniciar a resolver el problema . . . . .	141

XIII.37	Selección del sistema que hemos ingresado . . . . .	141
XIII.38	Ingreso de los datos del problema . . . . .	141
XIII.39	Selección de las condiciones de destilación . . . . .	142
XIII.40	Ingresa un 30 % de vapor en la alimentación . . . . .	142
XIII.41	Entalpías de las corrientes del sistema . . . . .	143
XIII.42	Resolución de los balances de masa . . . . .	143
XIII.43	Continuación del método gráfico McCabe-Thiele . . . . .	144
XIII.44	Búsqueda de la intersección entre la línea $q$ y el equilibrio. . . . .	144
XIII.45	Valor $x = 0.600$ ingresado . . . . .	145
XIII.46	Enriquecimiento cruzando en $x = 0.600$ . . . . .	145
XIII.47	Enriquecimiento cruzando en $x = 0.614$ . . . . .	145
XIII.48	Número de etapas mínimas requeridas en el problema. . . . .	146
XIII.49	Relación de reflujo utilizada . . . . .	146
XIII.50	Diagrama McCabe-Thiele con las etapas teóricas . . . . .	147
XIII.51	Etapas reales con $E_{oc} = 0.48766$ . . . . .	149
XIII.52	Determinación del reflujo mínimo ( $R_m$ ) . . . . .	154
XIII.53	Número de etapas mínimas requeridas . . . . .	155
XIII.54	Medición de los escalones tomando en cuenta la eficiencia . . . . .	155
XIII.55	Platos requeridos para la destilación . . . . .	156
XIII.56	Platos requeridos para la destilación con $E = 0.487$ . . . . .	156

## XV ANEXO 3: EXPERIMENTACIÓN

XV.1	Fotografía de la columna de destilación . . . . .	179
XV.2	Fotografía de la caldera pirotubular . . . . .	180
XV.3	Fotografía de la torre de enfriamiento . . . . .	180
XV.4	Fotografía del refractómetro . . . . .	181
XV.5	Índices de refracción (nD) en las destilaciones metanol-agua . . . . .	186
XV.6	Índices de refracción (nD) en las destilaciones etanol-agua . . . . .	190
XV.7	Temperaturas para cada plato de la columna de destilación . . . . .	192
XV.8	Índice de refracción a distintas soluciones para los compuestos utilizados . . . . .	195
XV.9	Diagrama realizado para la destilación EtOH 3, Toma A . . . . .	200
XV.10	Simulación de la destilación EtOH 3 a reflujo total . . . . .	201
XV.11	Concentraciones ( $x$ ) en las destilaciones metanol-agua . . . . .	206
XV.12	Concentraciones ( $x$ ) en las destilaciones etanol-agua . . . . .	208
XV.13	Diagrama de McCabe-Thiele, MetOH 1 . . . . .	212
XV.14	Diagrama de McCabe-Thiele, MetOH 2 . . . . .	212
XV.15	Diagrama de McCabe-Thiele, EtOH 1 . . . . .	213
XV.16	Diagrama de McCabe-Thiele, EtOH 2 . . . . .	213
XV.17	Diagrama de McCabe-Thiele, EtOH 3 . . . . .	213

## XVI ANEXO 4: PLANOS Y DIAGRAMAS

XVI.1	Modelo en 3D de la columna de destilación . . . . .	219
XVI.2	Vistas del modelo en 3D de la columna de destilación . . . . .	220
XVI.3	Modelo en 3D de un arreglo de dos platos . . . . .	226
XVI.4	Vistas del modelo en 3D de un arreglo de dos platos . . . . .	227

## RESUMEN

En este trabajo se elaboró una hoja de cálculo en línea mediante la cual el usuario puede resolver los balances de masa y energía, así como obtener los gráficos del método McCabe-Thiele, para por lo menos 19 sistemas binarios de forma completa y automática. Utilizando esta herramienta también se pueden obtener los datos de equilibrio Líquido-Vapor para cada uno de los 19 sistemas presentes a la presión que lo requiera. Esta herramienta se desarrolló en una hoja de cálculo de Google con lo cual se demostró también el potencial de estas en aplicaciones de Ingeniería Química. Se pone a disposición del lector el acceso, a través de un enlace de internet, a la herramienta realizada con su respectivo manual de usuario. Posteriormente se realizaron cinco destilaciones binarias en la columna de destilación del Laboratorio de Operaciones Unitarias de la Universidad del Valle de Guatemala con lo cual se demostró el uso del simulador realizado. Para complementar la experimentación realizada se presentan también los planos, un modelo 3D y el diagrama P&ID de la columna utilizada.

### **Palabras clave**

Destilación, McCabe-Thiele, hojas de cálculo, método gráfico, destilación binaria, etanol, metanol, Google, en línea.

## ABSTRACT

In the present work was elaborated an online spreadsheet for the user to solve the mass and energy balances, as well to obtain the graphs of the McCabe-Thiele method, for at least 19 binary systems in a complete and automated way. Using this tool is also possible to obtain the Vapor-Liquid equilibrium data for each of the 19 systems present at any pressure required. This tool was developed in Google Spreadsheets with which was demonstrated the potential of these in Chemical Engineering applications. The access to this tool is made available to the reader, via an internet link, along with the user manual. Subsequently, five distillations were carried out at the Unit Operations Laboratory at Universidad del Valle de Guatemala in order to demonstrate the use of the tool developed. To complement the experimentation performed this work presents the blueprints, a 3D model and a P&ID diagram of the distillation column used.

### **Keywords**

Distillation, McCabe-Thiele, Spreadsheets, Graphical Method, binary distillation, ethanol, methanol, Google, online.

# I. INTRODUCCIÓN

El presente trabajo tenía como finalidad elaborar una hoja de cálculo en la que estudiantes, catedráticos y otras personas interesadas en el tema de destilación pudieran resolver una destilación mediante Método de McCabe-Thiele incluyendo la resolución gráfica. Usualmente la resolución de este método, al ser un método gráfico, se realiza manualmente y mediante este trabajo se pretendía automatizar dicha operación. La herramienta realizada aplica únicamente a destilaciones binarias operando de forma continua o a reflujo total. Puede utilizarse tanto para destilaciones utilizando vapor vivo como utilizando rehervidor. No se desarrolló pensando en destilaciones de más de dos componentes ni destilaciones en columnas operando por lotes. La herramienta desarrollada incluye también la opción de calcular el equilibrio líquido-vapor de 19 sistemas binarios. Este cálculo se realizó utilizando la Ley de Raoult de las presiones parciales, modificada para usarse con soluciones no ideales, la ecuación de Antoine para determinar las presiones y temperatura de saturación, y los parámetros de Van Laar para obtener los coeficientes de actividad. Se tomaron como guía para la elaboración del presente trabajo, y de la hoja de cálculo realizada, los datos del *Perry's Chemical Engineers' Handbook* (Green y Perry, 2008). También fueron muy importantes los libros *Operaciones de transferencia de masa* (Treybal, 1988) y *Distillation* (Van Winkle, 1967) del curso Transferencia de Masa para conocer a detalle los requerimientos de una herramienta como esta hoja de cálculo que se deseaba desarrollar, de acuerdo también, al uso que los estudiantes de dicho curso tendrán de esta.

Se utilizaron, como plataforma para elaborar esta herramienta, las hojas de cálculo de Google con el objetivo de hacer más sencilla la difusión y el uso de ella y debido a que es una herramienta conocida por los estudiantes y accesible en cualquier lugar con disposición de internet. Puede incluso consultarse sin internet si se marca para tal fin previamente. Se utilizaron únicamente las funciones ya disponibles en las hojas de cálculo de Google, sin recurrir a programación complicada por fuera de estas. El único complemento utilizado fue el de *Solver*, ya que fue necesario su uso para el cálculo de los datos de equilibrio líquido-vapor. Se creó una base de datos con la cual el usuario tiene a su disposición 19 sistemas binarios a dos presiones diferentes (1 atm y 0.978 atm) con lo cual, si el usuario desea trabajar con estos datos, no necesita hacer uso de dicho complemento. En el caso de tener un sistema diferente de los 19 sistemas incluidos<sup>1</sup> el usuario tiene la opción de ingresar sus propios datos. Al final de la resolución el usuario obtiene el diagrama de McCabe-Thiele de la operación que deseaba resolver, puede incluso generar dicho diagrama tomando en cuenta la eficiencia de Murphree, ya sea del líquido o del vapor. También obtiene los balances de masa y energía resueltos, un esquema de la columna resultante y las concentraciones de las corrientes en cada etapa.

Como esta herramienta pretende ser utilizada también por estudiantes que cursan el Laboratorio de Operaciones Unitarias se realizaron varias destilaciones binarias alcohol-agua, evaluándolas a reflujo total, en las que se conocía la concentración de alimentación, y se obtuvo concentración del reflujo y del residuo. Con estos valores se simuló la operación en la hoja de cálculo y se obtuvieron los valores de eficiencia de Murphree del Líquido ( $E_{ML}$ ) con los cuales se trabajó. Se desarrollaron, para complementar la experimentación, varios diagramas de la columna del Laboratorio de Operaciones Unitarias, incluyendo unos planos de la columna completa (columna, condensador, rehervidor y estructura en la que se encuentra), unos planos de los platos en el interior de la columna, y un

---

<sup>1</sup>En la sección *Resultados* puede encontrar un listado de los 19 sistemas presentes en el simulador desarrollado.

diagrama de tuberías e instrumentación (P&ID) que incluye toda la instrumentación presente en la columna de destilación. Para elaborar los planos mencionados, se elaboró primero un modelo 3D de la columna en CAD del cual se presenta una captura de pantalla.

Se concluye el presente trabajo con todos los objetivos alcanzados, ya que se pudo trasladar completamente el método de McCabe-Thiele a una resolución digital. Se demostró que las hojas de cálculo de Google tienen mucho potencial en Ingeniería Química, y en general en otras ingenierías y carreras técnicas. Se presentaron también las otras opciones que se encontraban disponibles hasta el momento de elaborar este trabajo y se logró superar a cada una de estas, en la mayoría, si no en todos los aspectos al desarrollar esta herramienta. Se demostró la aplicación práctica de esta, mediante experimentación realizada y los resultados fueron satisfactorios. Finalmente, futuros estudiantes cuentan ya (sea a través de las hojas de cálculo realizadas como por los documentos y explicaciones complementarios que se incluyen en este trabajo) con un apoyo en el aprendizaje de la operación de destilación.

## II. OBJETIVOS

### A. Objetivo general

Desarrollar una hoja de cálculo que esté disponible en línea, la cual permita determinar el número de etapas requeridas en una columna de destilación fraccionada, utilizando el método de McCabe-Thiele para diferentes sistemas vapor-líquido, como herramienta en el Laboratorio de Operaciones Unitarias y como apoyo para la enseñanza de la operación de destilación.

### B. Objetivos específicos

- Configurar el cálculo de los datos de Equilibrio Líquido-Vapor, para varios sistemas binarios a varias presiones, usando la Ley de Raoult modificada para sistemas no ideales, la ecuación de Antoine y los parámetros de Van Laar.
- Configurar en la hoja de cálculo, los balances de masa y energía de la operación de destilación, aplicando el método de McCabe-Thiele, así como la resolución gráfica correspondiente, en conjunto con la eficiencia de Murphree, para obtener el número de platos teóricos y reales requeridos en una columna de destilación fraccionada, operando de forma continua en las condiciones especificadas por el usuario.
- Realizar varias destilaciones en la columna de platos del Laboratorio de Operaciones Unitarias, para los sistemas Etanol-Agua y Metanol-Agua, y simular dichas operaciones en la hoja de cálculo desarrollada en el objetivo anterior, utilizando las concentraciones de Destilado y Residuo resultantes, así como las condiciones de operación de dicha experimentación.

### III. JUSTIFICACIÓN

La operación de rectificación es una de las operaciones de separación utilizadas con mayor frecuencia (Treybal, 1988). En la Ingeniería Química constituye una operación de transferencia de masa y, como tal, forma parte del currículum de Ingeniería Química de la Universidad del Valle de Guatemala. La enseñanza de la operación de destilación por etapas se brinda durante el curso de Transferencia de Masa 1 y la aplicación práctica se realiza en el curso Laboratorio de Operaciones Unitarias 1. El análisis teórico incluye la elaboración del equilibrio líquido-vapor para varios sistemas, del balance de masa y energía de la columna de destilación así como un análisis gráfico a través del cual se grafica la información conocida para obtener información sobre el número de platos teóricos de una torre. Uno de los métodos utilizados durante el curso es el método de McCabe-Thiele. Este método requiere realizar operatoria matemática en una hoja de cálculo (e.g. Excel) y posteriormente parte de la resolución gráfica se realiza manualmente o utilizando alguna herramienta para edición de imágenes lo cual es una tarea simple pero que conlleva bastante tiempo ya que se debe estar dibujando sobre una gráfica de la forma más detallada posible. Además de utilizar este método, los problemas requieren otros resultados como calcular la eficiencia, o calcular dimensiones de equipo por lo que tener una forma sencilla de el número de platos requeridos implicaría un ahorro de tiempo y más disponibilidad de este para la enseñanza y el cálculo de estos otros requerimientos.

Tomando esto en cuenta, una solicitud por parte de la docencia del curso de Transferencia de Masa fue la de realizar un simulador del método McCabe-Thiele que contuviera la información de varios sistemas Líquido-Vapor y que realizara todo el procedimiento que hasta el momento se ha realizado manualmente. Realizando un simulador en una hoja de cálculo el cual tenga todos los pasos detallados del procedimiento y otras anotaciones importantes para el aprendizaje se puede lograr que la enseñanza de este tema sea más clara y se realice en menos tiempo dejando la posibilidad de demostrar más aplicaciones, realizar más ejercicios o cubrir otros temas. Además, este trabajo también se facilitaría la realización de cada uno de los pasos de los procedimientos, eliminando el tiempo invertido en imprimir el gráfico y dibujar manualmente, o realizar el dibujo a computadora. Otro de los beneficios es que se eliminaría el error siempre presente al realizar dibujos manualmente ya que sería la computadora la que realizaría los diagramas.

Entre los criterios indispensables para la realización del programa se encontraba el hecho de que el programa debía ser lo más sencillo de utilizar por parte de los estudiantes, así como de los catedráticos, y debe también permitir la posibilidad de distribuirse a cada uno de los estudiantes. Por esta razón se decidió resolver todo el método de McCabe-Thiele en una hoja de cálculo en línea, más específicamente, las hojas de Cálculo de Google. Estas permiten trabajar en cualquier lugar con conexión a internet. Permiten la colaboración al permitir que varias personas modifiquen el mismo archivo simultáneamente, por ello son una herramienta muy utilizada por los estudiantes a quienes está dirigido este trabajo. Esto propicia que sea la mejor opción con respecto a la sencillez de su uso especialmente en el curso de operaciones Unitarias ya que se trabaja grupalmente. Finalmente otro de los beneficios es que el profesor puede distribuir copias editables del programa o puede compartir la hoja que esté utilizando él para la explicación del tema mientras los estudiantes siguen sus pasos. De utilizarse en el curso de Transferencia de Masa y en el Laboratorio de Operaciones Unitarias de la Universidad del Valle de Guatemala, esta hoja estaría siendo utilizada, anualmente, por un promedio de 80 alumnos para resolución de problemas y aplicación práctica.

## IV. MARCO TEÓRICO

### A. Destilación

#### 1. Generalidades

La destilación es un método de separación de soluciones de dos o más líquidos solubles entre sí<sup>1</sup> los cuales tienen diferente volatilidad. En esta operación, se añade energía en forma de calor a una solución con el fin de formar una fase más, la fase de vapor, la cual también consta de los mismos componentes que la fase original. Sin embargo, estos componentes se distribuyen de manera diferente en la fase líquida y en la fase gaseosa: La fase de vapor, que después se separa y se condensa, tendrá una mayor concentración de la sustancia más volátil mientras que la fase líquida, desde la cual se obtuvo la segunda fase, tendrá una mayor concentración del componente menos volátil (Treybal, 1988).

Esta operación es comúnmente utilizada por las ventajas que posee ya que no deben añadirse más sustancias para la separación y porque la solución final difiere de la original, aparte de la diferencia de concentración, solamente por su contenido calórico (que se encuentra en fase vapor) pero dicho calor se elimina sin dificultad obteniendo una nueva solución condensada. Hay que tomar en cuenta, sin embargo, que es una operación que consume grandes cantidades de energía ya que debe añadirse calor y eliminarse posteriormente (ibíd.). Se hablarán de los balances de masa y energía en secciones posteriores.

#### 2. Equilibrio líquido y vapor de sistemas binarios

Para utilizar los métodos de destilación se debe conocer el equilibrio que existe entre la fase líquida y la fase de vapor de las mezclas. Cuando las dos fases se encuentran en equilibrio físico se obtiene la máxima diferencia relativa de la concentración de los compuestos en las fases por lo que es deseable lograr dicho equilibrio. Debido a esto los cálculos para el diseño cuantitativo de sistemas de destilación utilizan información del equilibrio de las mezclas la cual puede ser obtenida de la literatura técnica, puede ser determinada experimentalmente o calculada mediante el uso de correlaciones teóricas o empíricas (Van Winkle, 1967). El equilibrio en un sistema está dado por tres variables importantes: Presión ( $P$ ), Temperatura ( $T$ ) y composición (una fracción molar o másica, usualmente  $x$ ). Para facilitar el estudio se fija una de las dos primeras variables y se estudian los equilibrios a *temperatura constante* o a *presión constante*. Sin embargo, debido a que la operación de destilación siempre se realiza prácticamente a presión constante solamente los datos del equilibrio a estas condiciones son utilizados en los cálculos de diseño (ibíd.). Será este tipo de equilibrio el que se ampliará a continuación. Para profundizar más sobre el equilibrio líquido-vapor consultar el Capítulo 10 del libro *Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química* de Smith, Van Ness y Abbott (2005).

---

<sup>1</sup>En el presente trabajo se abarcarán únicamente las soluciones binarias, tanto en la presentación de la teoría como en el desarrollo del simulador y la experimentación.

### a. Mezclas ideales

El concepto de los Gases Ideales, los Líquidos Ideales y Mezclas Ideales son la base de muchas relaciones cuantitativas utilizadas para describir equilibrios. En el campo de destilación existen algunas leyes que son de importancia. Una de estas es la *ley de Dalton de las presiones parciales*. Esta ley indica que la presión total de una mezcla de gases, que no reaccionan entre sí, es igual a la suma de las presiones parciales de los gases mezclados tal y como se muestra en (IV.1). Dalton también postuló que la presión parcial de un gas ideal en una mezcla gaseosa es proporcional a su fracción molar tal y como se indica en (IV.2) (Van Winkle, 1967).

$$P_t = \sum_1^n p_i = p_1 + p_2 + \dots + p_n \quad (\text{IV.1})$$

$$p_i = y_i P_t \quad (\text{IV.2})$$

Otra ley importante en destilación es la Ley de Raoult la cual relaciona la presión ejercida por un componente en la fase gaseosa con su concentración en la fase líquida y la presión de vapor de dicho componente. Esta relación está dada por la ecuación (IV.3).

$$p_i = x_i P_i^{sat} \quad (\text{IV.3})$$

Se puede obtener una expresión que describa las fases gaseosa y líquida de una mezcla ideal combinando ambas leyes obteniendo la siguiente relación:

$$P_t = \sum_1^n p_i = \sum_1^n y_i P_t = \sum_1^n x_i P_i^{sat} \quad (\text{IV.4})$$

Para un componente  $i$  dado la composición en cada una de las fases están relacionadas por:

$$y_i P_t = x_i P_i^{sat} \quad (\text{IV.5})$$

La *presión de vapor* ( $P_i^{sat}$ ) es una propiedad única de cada componente y es una función directa de la temperatura. Un compuesto que, a una temperatura dada, tiene una presión de vapor mayor que otro compuesto se dice que es más volátil. La presión de vapor se relaciona con la temperatura utilizando la ecuación Antoine que se muestra a continuación:

$$\log P^{sat} = A - \frac{B}{T^{sat} + C} \quad (\text{IV.6})$$

En la ecuación anterior  $A$ ,  $B$ , y  $C$  son constantes para un compuesto en particular en un rango de temperatura dado. Los valores de dichas constantes se pueden obtener de diferentes referencias pero se debe tomar en cuenta las unidades de las constantes que deben ser consistentes con las unidades de temperatura y presión utilizadas. En el *Manual del Ingeniero Químico* (Green y Perry, 2008) se utiliza la temperatura en grados centígrados ( $^{\circ}C$ ) y la presión de vapor se obtiene en Torr utilizándose las constantes que se presentan en el Cuadro IV.1.

### b. Equilibrio líquido-vapor para mezclas no ideales

Para obtener modelos de Equilibrio Líquido-Vapor la ecuación (IV.5) provee una descripción de los sistemas suponiendo que la fase de vapor es un gas ideal y la fase líquida es una solución ideal. Sin embargo en los líquidos las fuerzas de atracción entre moléculas son grandes debido a que la distancia entre estas es pequeña. El comportamiento de los líquidos es no ideal y se evidencia, por ejemplo, en la no-aditividad del volumen cuando se mezclan los compuestos en solución. Por tanto, se obtiene una ecuación mucho más realista, a presiones bajas y moderadas, cuando se toman en cuenta las desviaciones en la idealidad de las soluciones en la fase líquida. El grado de desviación de la no-idealidad de los componentes en soluciones líquidas es medido por el *Coefficiente de Actividad*

( $\gamma$ ). Si se aplica este factor de corrección a la Ley de Raoult se obtiene entonces la expresión (IV.7) que se conoce como la *Ley de Raoult modificada* (Smith, Van Ness y Abbott, 2005; Van Winkle, 1967).

$$y_i P = x_i \gamma_i P_i^{sat} \quad (IV.7)$$

En las aplicaciones de destilación usualmente no se toman en cuenta las desviaciones de la idealidad en la fase gaseosa ya que la mayoría de destilaciones se realizan a bajas y moderadas presiones en donde la fase gaseosa se comporta como esencialmente ideal por lo que una corrección para la fase líquida a presión constante resulta suficiente (Van Winkle, 1967). Se han obtenido varias correlaciones para obtener el Coeficiente de Actividad ( $\gamma$ ), seis expresiones populares son las ecuaciones de Margules, Van Laar, Wilson, NRTL, UNIFAC y UNICUAC. Los dos modelos más sencillos son Margules y Van Laar, tienen la ventaja de ser algebraicamente sencillos, algunos simuladores los usan por su bajo consumo de tiempo de CPU y, aunque no son muy utilizados en la industria ya que se restringen a sistemas binarios, son suficientes para los fines del presente trabajo (Green y Perry, 2008; Mattews y Ritter, 2001). De estos dos se ampliará únicamente la ecuación de Van Laar que es la ecuación que se eligió siguiendo el ejemplo de Jevric y Fayed (Dic. 2002) en el artículo *Shortcut Distillation Calculations via Spreadsheets*.

Las ecuaciones de Van Laar dependen de dos parámetros  $A_{12}$  y  $A_{21}$  denominados *Parámetros de interacción binaria* los cuales se presentan en el Cuadro IV.1 y fueron obtenidos del *Manual del Ingeniero Químico* (Green y Perry, 2008). A continuación se presentan las dos ecuaciones con las que se obtiene el Coeficiente de actividad de cada compuesto (ibíd.):

$$\ln \gamma_1 = A_{12} \left( \frac{A_{21} x_2}{A_{12} x_1 + A_{21} x_2} \right)^2 \quad (IV.8)$$

$$\ln \gamma_2 = A_{21} \left( \frac{A_{12} x_1}{A_{12} x_1 + A_{21} x_2} \right)^2 \quad (IV.9)$$

### c. Diagramas de fases de sistemas binarios

El equilibrio de un sistema binario de dos fases, una fase líquida y una fase de vapor, se pueden representar adecuadamente en diagramas de dos dimensiones como los presentados en la Figura IV.1. Usualmente se diagrama en relación al compuesto más volátil, el cual en esta figura se denomina compuesto A. Se presenta en (a) un diagrama  $T-x, y$  En el que la abscisa se extiende desde una composición del componente A de 0.0 hasta una composición de 1.0, es decir el componente A puro. La curva superior indica la relación entre la temperatura y la composición del vapor en equilibrio ( $T-y^*$ ) y la curva inferior la relación entre la temperatura y la composición del líquido ( $T-x$ ).

Las mezclas de líquido y vapor en equilibrio se encuentran a la misma temperatura y presión y están representadas por las *líneas de unión* como la línea  $DF$ . El punto  $D$  representa una mezcla en el equilibrio que se encuentra únicamente en fase líquida (un líquido saturado) y el punto  $F$  representa a una mezcla en el equilibrio que se encuentra únicamente en fase gaseosa (vapor saturado). El punto  $E$  representa una mezcla en las que están las dos fases (líquido y vapor) simultáneamente, la composición de la fase líquida es la misma que la del punto  $D$  y la composición en la fase gaseosa la misma que en el punto  $F$ . La proporción de vapor y de líquido en la mezcla está relacionada con la posición del punto  $E$  en la línea de unión tal y como se muestra en (IV.10). Por ejemplo, suponiendo que el segmento  $EF$  fuera un 60% del segmento  $DF$  se tendría que en la mezcla (que consta de ambas fases) los moles de vapor constituyen el 60% de los moles totales (Treybal, 1988).

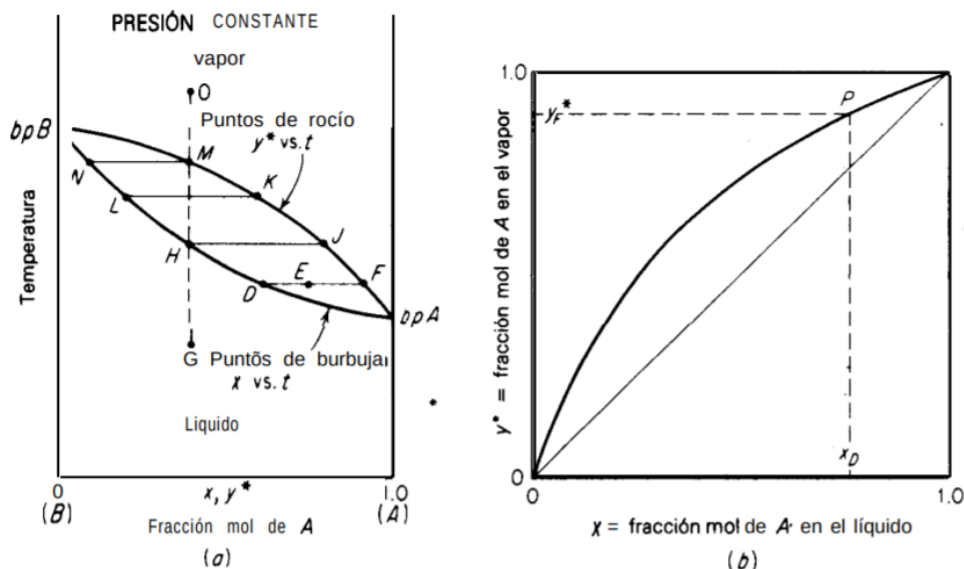
$$\frac{\text{Moles de } D}{\text{Moles de } D + \text{Moles de } F} = \frac{\text{Línea } EF}{\text{Línea } DF} \quad (IV.10)$$

Cuadro IV.1: Constantes de Antoine y de Van Laar para varios sistemas

Sistema <sup>a</sup>	Constantes de Van Laar			Compuesto 1 - Constantes de Antoine			Compuesto2 - Constantes de Antoine		
	A.12	A.21	A	B	C	A	B	C	
1-Propanol (1), Agua (2)	2.9095	1.1572	8.37895	1788.020	227.438	8.07131	1730.630	233.426	
2-Propanol (1), Agua (2)	2.4702	1.0938	8.87829	2010.320	252.636	8.07131	1730.630	233.426	
Acetato de etilo (1), Etanol (2)	0.8552	0.7526	7.10179	1244.951	217.881	7.58670	1281.590	193.768	
Acetato de metilo (1), Metanol (2)	0.9614	1.0126	7.06524	1157.630	219.726	8.08097	1582.271	239.726	
Acetona (1), Agua (2)	2.1041	1.5555	7.11714	1210.595	229.664	8.07131	1730.630	233.426	
Acetona (1), Cloroformo (2)	-0.8643	-0.5899	7.11714	1210.595	229.664	6.95465	1170.966	226.232	
Acetona (1), Metanol (2)	0.6184	0.5797	7.11714	1210.595	229.664	8.08097	1582.271	239.726	
Agua (1), 1-butanol (2)	1.0996	4.1760	8.07131	1730.630	233.426	7.36366	1305.198	173.427	
Agua (1), Ácido Acético (2)	0.4973	1.0623	8.07131	1730.630	233.426	8.02100	1936.010	258.451	
Agua (1), Ácido Fórmico (2)	-0.2935	-0.2757	8.07131	1730.630	233.426	6.94459	1295.260	218.000	
Cloroformo (1), Metanol (2)	0.9356	1.8860	6.95465	1170.966	226.232	8.08097	1582.271	239.726	
Etanol (1), Agua (2)	1.6798	0.9227	7.58670	1281.590	193.768	8.07131	1730.630	233.426	
Etanol (1), Benceno (2)	1.8570	1.4785	7.58670	1281.590	193.768	6.87987	1196.760	219.161	
Metanol (1), Acetato de etilo (2)	1.0017	1.0524	8.08097	1582.271	239.726	7.10179	1244.951	217.881	
Metanol (1), Agua (2)	0.8141	0.5619	8.08097	1582.271	239.726	8.07131	1730.630	233.426	
Metanol (1), Benceno (2)	2.1623	1.7925	8.08097	1582.271	239.726	6.87987	1196.760	219.161	
n-Hexano (1), Etanol (2)	1.9195	2.8463	6.91058	1189.640	226.28	7.58670	1281.590	193.768	
Tetracloruro de carbono (1), Benceno (2)	0.0951	0.0911	6.84083	1177.910	220.576	6.87987	1196.760	219.161	
Tetrahidrofurano (1), Agua (2)	3.0216	1.9436	6.99515	1202.290	226.254	8.07131	1730.630	233.426	

<sup>a</sup>Datos obtenidos de los cuadros 13-2 y 13-4 de la 8va. edición del *Perry's Chemical Engineers' Handbook* (Green y Perry, 2008).

Figura IV.1: Equilibrio líquido-vapor a presión constante



Fuente: Treybal (1988)

Las composiciones vapor-líquido en equilibrio también pueden representarse en un diagrama ( $x$ - $y^*$ ) como se muestra en la Figura IV.1 (b) que presenta en la abscisa la composición del compuesto A en la fase líquida y en el eje vertical la correspondiente composición de A en la fase gaseosa en equilibrio. El punto P sobre este diagrama representa la línea de unión  $DF$ . La diagonal de 45 grados se muestra como referencia e indica una composición  $y$  de igual magnitud a la composición  $x$ , se verá posteriormente los usos prácticos que esta tiene. La curva de equilibrio, sobre la cual se diagrama el punto P, se encuentra por encima de la diagonal de 45° ya que la composición en el vapor es más rica en el compuesto más volátil (Treybal, 1988).

### 3. Composiciones masa y mol

A la hora de trabajar todo tipo de operaciones binarias es importante saber las concentraciones con las que se está trabajando. Las dos maneras más utilizadas para expresar dichas concentraciones son las *fracciones molares* y las *fracciones másicas*. Estas indican el cociente de una parte del sistema en relación al sistema total. Las fracciones tienen las siguientes propiedades:

- Se consideran adimensionales por tener la misma unidad en el numerador y en el denominador, pero en realidad para efectos de manejo de unidades debe recordarse que tienen la siguiente definición:

$$x = \frac{\text{mol soluto}}{\text{moles totales}}$$

$$X = \frac{\text{masa soluto}}{\text{masa total}}$$

- Pueden tomar solo valores entre 0 y 1
- Todas las fracciones de los componentes presentes en disolución han de sumar 1. De esto se deriva que en un sistema binario la composición del segundo compuesto pueda expresarse como  $x_2 = 1 - x_1$ .

En este trabajo las fracciones molares se expresan con letras en minúscula y las fracciones másicas con letras en mayúscula. Las letras más utilizadas son las siguientes:

- $x$  para representar la composición de un líquido
- $y$  para representar la composición de un vapor
- $z$  para representar la composición de una corriente en cualquier estado térmico, puede corresponder a una mezcla de líquido y vapor

La relación entre las fracciones mol y las fracciones masa, para un sistema binario de compuestos 1 y 2, está dada por:

$$z \frac{\text{mol soluto 1}}{\text{mol solución}} = \frac{\frac{Z \frac{\text{g soluto 1}}{\text{g solución}}}{M_1 \frac{\text{g soluto 1}}{\text{mol soluto 1}}}}{\frac{Z \frac{\text{g soluto 1}}{\text{g solución}}}{M_1 \frac{\text{g soluto 1}}{\text{mol soluto 1}}} + \frac{(1-Z) \frac{\text{g soluto 2}}{\text{g solución}}}{M_2 \frac{\text{g soluto 2}}{\text{mol soluto 2}}}}$$

Sin las dimensionales la ecuación sería:

$$z = \frac{\frac{Z}{M_1}}{\frac{Z}{M_1} + \frac{(1-Z)}{M_2}}$$

Si la letra que indica la fracción no tiene ningún subíndice que indique el compuesto se asume que se trata del compuesto principal que se está trabajando, en el presente trabajo dicho compuesto es el Compuesto 1 que es el más volátil. Las fracciones molares también pueden expresarse en porcentajes de manera que sus valores estén entre 0 y 100.

#### 4. Cálculo de entalpías

Para el balance de energía son necesarias las entalpías en el sistema tanto en estado líquido como en estado gaseoso. Las entalpías de los líquidos saturados se calculan incluyendo tanto el calor sensible como el calor de mezclado de los componentes y están dadas por:

$$H_L = C_{pL,m}(T_{sat} - T_{ref}) + \Delta H_S \quad (\text{IV.11})$$

En donde  $T_{ref}$  es la temperatura de referencia utilizada y  $\Delta H_S$  es el calor de disolución a la temperatura de referencia.  $C_{pL,m}$  Es la capacidad calorífica específica promedio de la solución. Esta se calcula mediante:

$$C_{pL,m} = x_1 * C_{pL,1} + (1 - x_1) * C_{pL,2} \quad (\text{IV.12})$$

En la ecuación (IV.12) se utilizan la composición del compuesto más volátil  $x_1$  y la capacidad calorífica de ambos compuestos. Cada una de las capacidades caloríficas se puede calcular en  $J/(mol \cdot K)$  utilizando las constantes presentadas en el Cuadro No. IV.2, y la temperatura de referencia ( $T_{ref}$ ), mediante la siguiente ecuación (Green y Perry, 2008):

$$C_{pL} = C_1 + C_2T + C_3T^2 + C_4T^3 + C_5T^4 \quad (\text{IV.13})$$

Las entalpías del vapor saturado se calculan tomando en cuenta el calor latente de la solución, el cual es el valor de la energía requerida para llevar la solución de líquido saturado a gas saturado. La entalpía del gas está dada por:

$$H_G = H_L + \lambda_{sol} = C_{pL,m}(T_{sat} - T_{ref}) + \Delta H_S + \lambda_{sol} \quad (\text{IV.14})$$

En donde:

$$\lambda_{sol} = x_1\lambda_1 + (1 - x_1)\lambda_2 \quad (\text{IV.15})$$

$$\lambda = \Delta H_V = C_1(1 - T_r)^{C_2+C_3T_r+C_4T_r^2+C_5T_r^3} \quad (\text{IV.16})$$

El valor del calor latente se calcula, para cada compuesto, mediante la ecuación (IV.16) utilizando las constantes que se presentan en el Cuadro No. IV.2. En dicha ecuación  $T_r$  es la temperatura reducida que se obtiene mediante  $T_r = T/T_c$ , en donde  $T$  es la temperatura de saturación de la solución. El calor latente obtenido utilizando dichas constantes y dicha ecuación se obtiene en  $J/mol$ .

Cuadro IV.2: Constantes para calcular la capacidad calorífica y el calor latente de varias sustancias líquidas

Compuesto	Fórmula	M.molar	Capacidad calorífica [J/(kmol K)]					Calor Latente [J/kmol]					Tc, K
			C1	C2	C3	C4	C5	C1	C2	C3	C4		
1-butanol	$C_4H_{10}O$	74.122	191,200	-730.4000	2.2998			71,274,000	0.04830	0.897	-0.512	563.100	
1-Propanol	$C_3H_8O$	60.095	158,760	-635.0000	1.9690			68,988,000	0.64580	-0.538	0.332	536.800	
2-Propanol	$C_3H_8O$	60.095	471,710	-4172.1000	14.7450	-0.01440		72,542,000	0.79137	-0.661	0.342	508.300	
Acetato de etilo	$C_4H_8O_2$	88.105	226,230	-624.8000	1.4720			49,330,000	0.38470			523.300	
Acetato de metilo	$C_3H_6O_2$	74.079	61,260	270.9000				44,920,000	0.36850			506.550	
Acetona	$C_3H_6O$	58.079	135,600	-177.0000	0.2837	0.00069		42,150,000	0.33970			508.200	
Ácido Acético	$C_2H_4O_2$	60.052	139,640	-320.8000	0.8985			40,179,000	2.60370	-5.003	2.707	591.950	
Ácido Fórmico	$CH_2O_2$	46.026	78,060	71.5400				23,195,000	1.90910	-5.000	3.264	588.000	
Agua	$H_2O$	18.015	276,370	-2090.1000	8.1250	-0.01412	9.37E-06	52,053,000	0.31990	-0.212	0.258	647.096	
Benceno	$C_6H_6$	78.112	129,440	-169.5000	0.6478			45,346,000	0.39053			562.050	
Cloroformo	$CHCl_3$	119.378	124,850	-166.3400	0.4321			41,860,000	0.03584			536.400	
Etanol	$C_2H_6O$	46.068	102,640	-139.6300	-0.0303	0.00204		55,789,000	0.31245			514.000	
Metanol	$CH_4O$	32.042	105,800	-362.2300	0.9379			50,451,000	0.33594			512.500	
n-Hexano	$C_6H_{14}$	86.175	172,120	-183.7800	0.8873			44,544,000	0.39002			507.600	
Tetracloruro de carbono	$CCl_4$	153.823	-752,700	8966.1000	-30.3940	0.03446		43,252,000	0.37688			556.350	
Tetrahidrofurano	$C_4H_8O$	72.106	171,730	-800.4700	2.8934	-0.00250		43,021,000	0.36972			540.150	

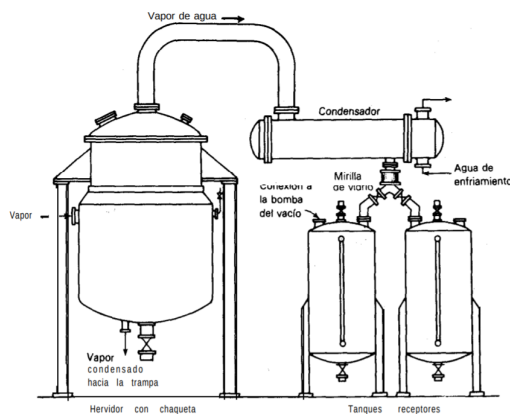
Fuente: Green y Perry (2008)

## 5. Tipos de destilación

Existen muchas variantes de las operaciones de destilación y algunas operaciones relacionadas. Sin embargo la clasificación principal separa la operación de destilación en: Destilación Simple y Destilación por etapas o fraccionamiento.

La *destilación simple* puede ser realizada en operación por lotes y en operación continua. En el caso de una operación por lotes como la que se presenta en la Figura IV.2, un lote de la solución a separar se carga en un recipiente con una chaqueta de vapor, este líquido se hierve lentamente y los vapores se pasan por un condensador conforme se forman. Este líquido ya condensado, que se denomina *destilado* se almacena en un primer tanque receptor. Conforme avanza la destilación los destilados subsiguientes se irán almacenando en tanques separados. La primera porción del destilado será más rica en la sustancia más volátil y conforme avanza el proceso el destilado va teniendo una menor concentración de dicha sustancia.

Figura IV.2: Destilación simple en operación por lotes

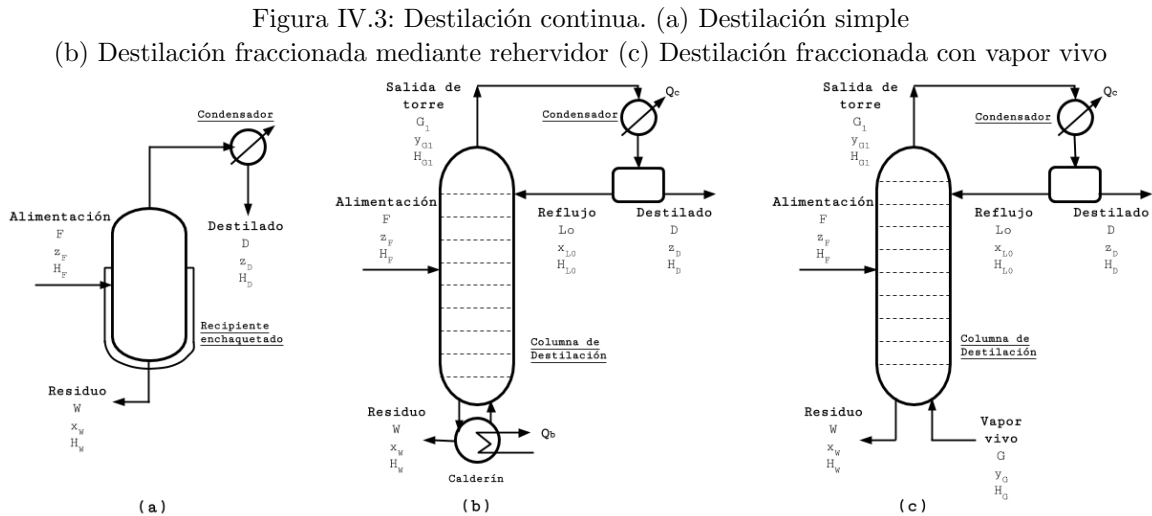


Fuente: Treybal (1988)

En una destilación simple en operación continua, la alimentación se carga continuamente en el recipiente y se extrae permanentemente un flujo de destilado y un flujo de residuo tal y como se muestra en la Figura IV.3(a). En esta destilación, en caso de alcanzarse completamente el equilibrio, se obtiene permanentemente un destilado con la concentración del vapor que está en equilibrio con el líquido alimentado. El otro tipo de destilación comúnmente utilizado es la *destilación por etapas*, conocida también como *destilación fraccionada*. De esta destilación se tienen dos variantes en las que la diferencia entre ellas es la forma en que se añade energía al sistema. Como se muestra en la figura IV.3(b) puede utilizarse un rehervidor en el cual se añade energía térmica a la solución mediante intercambio de calor. En la Figura IV.3(c) se muestra una destilación fraccionada en la que se utiliza vapor de agua para proporcionar directamente el calor que se requiere. Esto puede realizarse únicamente cuando se está fraccionando una solución acuosa y el agua se elimina como producto residual (Treybal, 1988).

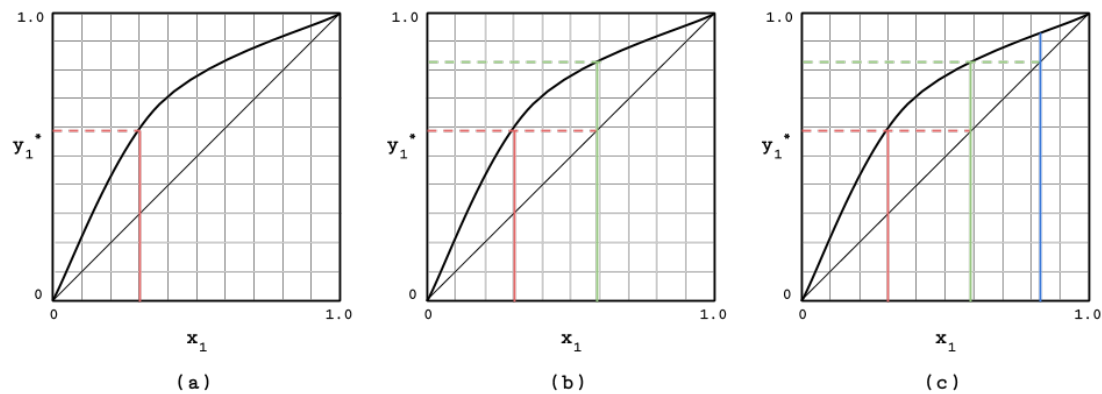
A través de la destilación fraccionada se es capaz de obtener un destilado con una mayor pureza que en la destilación simple. Como se muestra en la Figura IV.4(a) si un líquido (p.ej.  $x=0.30$ ) se evapora en una destilación sencilla, el vapor obtenido se obtiene únicamente a su concentración de equilibrio, en este caso<sup>2</sup>  $y^*=0.59$  aproximadamente. A la hora de condensar dicho vapor se ha obtenido un líquido destilado a dicha concentración. Este cambio de  $y^*$  (como vapor) a  $x$  (ahora como condensado) se puede ver fácilmente si se extiende una línea horizontal hacia la diagonal de 45°. Sin

<sup>2</sup>Se hace uso de una curva de equilibrio arbitraria.



embargo si este nuevo líquido se evapora nuevamente tal y como se muestra en la Figura IV.4(b) se obtendrá su correspondiente vapor en el equilibrio indicado por la parte superior de la segunda línea vertical. En IV.4(c) se muestra cuando se repite este proceso. Como se logra apreciar, en cada destilación simple consecutiva se obtiene una pureza del destilado mucho mayor y es esta mejora en la pureza la que se logra al realizar una operación fraccionada. Cada etapa en una columna de destilación describe una pequeña destilación simple y en cada etapa se busca que el vapor y el líquido lleguen al equilibrio.

Figura IV.4: Destilaciones simples consecutivas



## 6. Destilación fraccionada

Como se había mencionado anteriormente una destilación fraccionada es una operación a varias etapas. Es también una operación a contracorriente: el vapor pasa etapa por etapa subiendo a través de la columna de destilación y el líquido se desplaza hacia abajo disminuyendo la concentración del componente más volátil conforme se desplaza hacia la parte inferior de la columna. La alimentación se introduce en la columna de modo más o menos centrado tal y como se muestra en la Figura IV.3(b) y (c). La sección de la columna que se encuentra por encima de la etapa de alimentación se denomina sección de *absorción*, *de enriquecimiento* o *de rectificación*. En esta sección el vapor que se eleva se lava con lo que se denomina *reflujo*. Este no es más que parte del destilado, ya condensado, que se devuelve a la parte superior de la torre y ayuda a mejorar la absorción y por tanto la eficiencia. La

sección por debajo de la etapa de alimentación se denomina *desorbedora* o *de agotamiento*. En esta sección el vapor generado o introducido en la parte inferior ayuda a desorber el componente volátil. El líquido que se elimina por la parte inferior de la torre se denomina *residuo* o *fondos* (Treybal, 1988).

Para soluciones binarias mediante el método de fraccionamiento es posible obtener con un alto nivel de pureza los componentes a separar, aunque hay excepciones como en el caso de los azeótropos. Debido a estas ventajas este método se utiliza frecuentemente. Al calcular una columna de destilación se debe determinar el número de etapas necesarias para obtener una pureza deseada, también debe determinarse la etapa de alimentación. Si se conoce el flujo alimentado se puede obtener también el flujo de destilado y de residuo.

#### a. Balance de masa, materia y energía

En la Figura IV.5 se presentan los dos casos de destilación fraccionada estudiados: Destilación mediante rehervidor o calderín y Destilación con Vapor Vivo. En ambos casos la parte superior de la torre, encerrada en la figura mediante el *Entorno I*, es igual y el balance es el mismo. La relación molar entre el reflujo que se regresa a la torre y el destilado separado se denomina *Relación de Reflujo*, también llamada relación de reflujo externo. Está dada por la ecuación (IV.17) y se representa mediante  $R$  (ibíd.).

$$R = \frac{L_0}{D} \quad (\text{IV.17})$$

Realizando un balance de masa para el Entorno I que encierra al condensador y al recipiente en que se separa el reflujo del destilado se tiene:

$$G_1 = D + L_0$$

Tomando en cuenta la relación de reflujo en (IV.17) el balance se escribe como  $G_1 = D + RD$  y simplificando se obtiene:

$$G_1 = D(R + 1) \quad (\text{IV.18})$$

Ahora, se realiza también un balance de energía para este entorno (I) porque se desea conocer la carga térmica del condensador. El balance de energía en el Entorno I da:

$$G_1 H_{G_1} = Q_c + L_0 H_{L_0} + D H_D$$

Si se sustituye (IV.18), para dejar todo en términos del destilado y la relación de reflujo, y se realiza simplificación entonces se tiene:

$$D(R + 1)H_{G_1} = Q_c + RDH_{L_0} + DH_D$$

$$Q_c = D(R + 1)H_{G_1} - RDH_{L_0} - DH_D$$

$$Q_c = D[(R + 1)H_{G_1} - RH_{L_0} - H_D]$$

Si se utiliza un condensador total, que condensa todo el vapor pero no enfría más el líquido entonces ambos flujos, destilado y reflujo, son líquidos saturados en la misma condición y  $H_{L_0} = H_D$ , por tanto el balance para el condensador es:

$$Q_c = D[(R + 1)H_{G_1} - RH_D - H_D]$$

$$Q_c = D[(R + 1)H_{G_1} - H_D(R + 1)]$$

$$Q_c = D(R + 1)(H_{G_1} - H_D) \quad (\text{IV.19})$$

Se realiza ahora un balance de masa total para poder especificar todo el sistema. Un balance de materia en el Entorno II para una *destilación con rehervidor* (Figura IV.5(a)) da como resultado:

$$F = D + W \quad (\text{IV.20})$$

El correspondiente balance de materia es:

$$Fz_F = Dx_D + Wx_W \quad (\text{IV.21})$$

Al realizar el balance de energía en el Entorno II (Figura IV.5(a)) se debe tomar en cuenta la carga térmica del rehervidor ( $Q_b$ ). En la ecuación (IV.22) se presenta el balance de energía, e incluye también el término  $Q_T$  que se refiere a todas las pérdidas de calor que puedan existir en el sistema ya que la mayoría de destilaciones se realizan a temperaturas mayores a la temperatura ambiente y la capacidad de aislamiento de los materiales son finitas.

$$FH_F + Q_b = DH_D + WH_W + Q_c + Q_T \quad (\text{IV.22})$$

Para la destilación mediante *Vapor vivo* (Figura IV.5(b)) el balance de masa global está dado por:

$$F + G = D + W \quad (\text{IV.23})$$

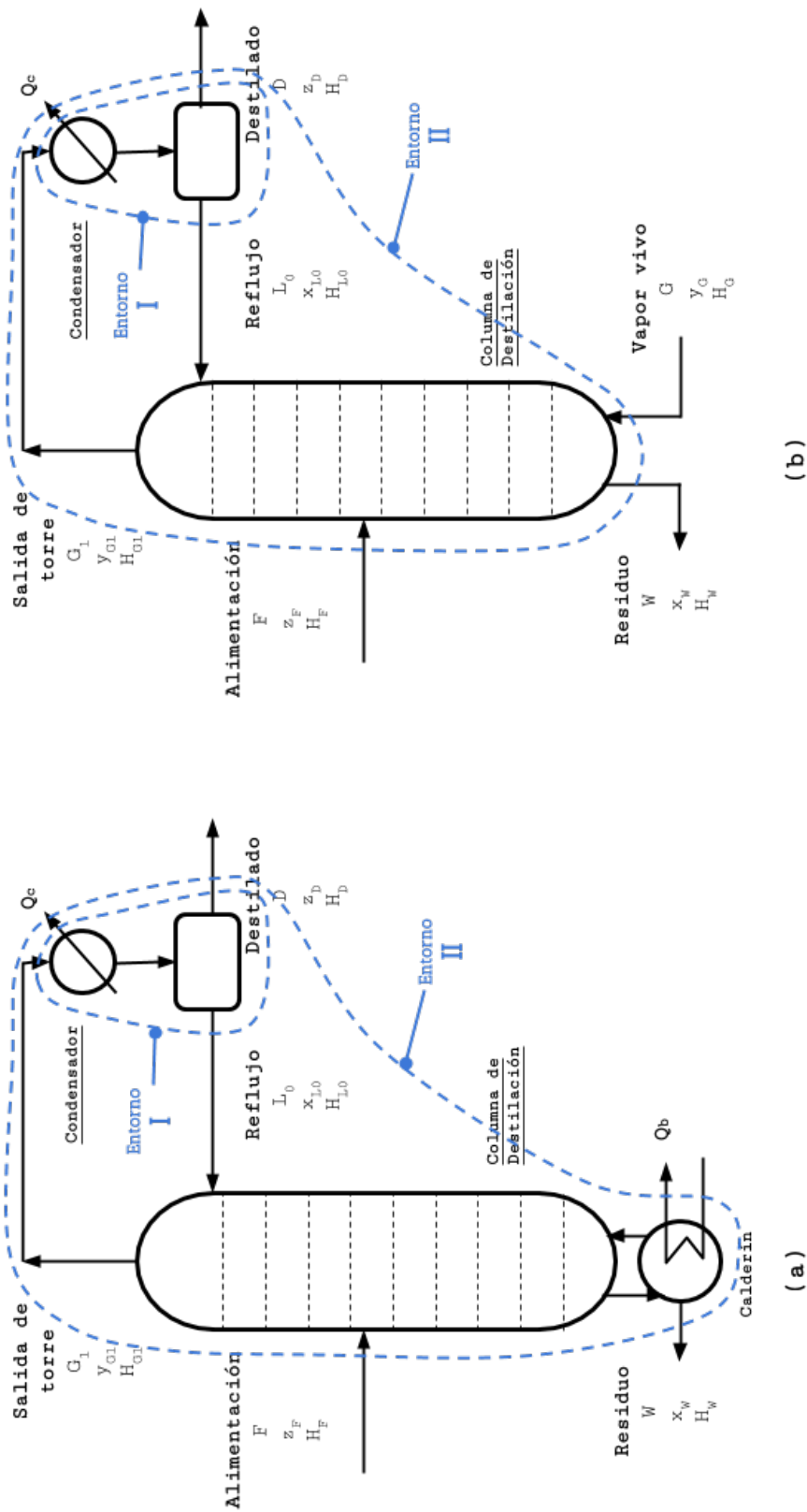
En la ecuación anterior el término  $G$  se refiere al vapor de agua suministrado para la operación. Se realiza luego el balance de materia en el que  $y_G$  es la composición del vapor. Normalmente  $y_G = 0$  ya que el vapor de agua no lleva ningún contenido del otro compuesto.

$$Fz_F + Gy_G = Dx_D + Wx_W \quad (\text{IV.24})$$

El balance de energía del sistema para destilación con vapor vivo es:

$$FH_F + GH_G = DH_D + WH_W + Q_c + Q_T \quad (\text{IV.25})$$

Figura IV.5: Entornos para balances de materia y energía  
 (a) Destilación fraccionada mediante rehevador (b) Destilación fraccionada con vapor vivo



Fuente: Elaboración propia. Adaptado de Treybal (1988)

## 7. Método de McCabe-Thiele

McCabe-Thiele es un método gráfico para calcular el número de etapas necesarias, para una destilación dada, la etapa de alimentación en relación a la condición energética de esta y las composiciones de productos. Este es el método más sencillo y no requiere muchos datos detallados de entalpía (Treybal, 1988). Este método se basa en la representación de los balances de materia como líneas de operación en el diagrama  $x$ - $y$ . Estas líneas son rectas ya que se asumen *flujos molares constantes* a lo interno de la columna. El flujo de la fase líquida se asume constante de etapa a etapa en cada sección de la columna y lo mismo ocurre con el flujo de la fase gaseosa. Esta suposición se basa en otras suposiciones termodinámicas entre las que se encuentran (Green y Perry, 2008):

- Ambos componentes poseen calores de vaporización molares iguales
- Se realiza una operación adiabática (no hay pérdidas de calor)
- No hay efecto del calor de mezclado
- No hay efecto de calor sensible (en el interior de la columna se trabaja en el equilibrio)

### a. Desarrollo de las ecuaciones para McCabe-Thiele

Para desarrollar las ecuaciones del método de McCabe-Thiele se deben de realizar varios balances de materia tal y como se muestran en la Figura IV.6. Estos se realizan en: la sección de enriquecimiento, la sección de agotamiento y la alimentación.

Como se había mencionado la sección de enriquecimiento se encuentra por sobre la etapa de alimentación. El condensador elimina todo el calor latente del vapor saliente de la torre  $G_1$  pero no enfría más el líquido resultante por lo que los flujos de destilado ( $D$ ) y reflujo ( $L_0$ ) son líquidos saturados y  $y_1 = y_D = x_0$ . El flujo de líquido dentro de la torre ( $L$ , en moles/h) que desciende de etapa en etapa y el flujo de vapor que asciende ( $G$ , en moles/h) ambos son flujos constantes si se mantiene la suposiciones simplificadoras. Por tanto se identifican solamente mediante  $L$  y  $G$ , sin subíndices que indiquen la etapa (Treybal, 1988). Sin embargo, las concentraciones sí cambian de etapa en etapa y por ello se identifican mediante un subíndice que indica el número de etapa de la que provienen. Las etapas que se muestran son etapas teóricas o ideales por lo que la composición  $y_2$  saliente de la segunda etapa (Entorno IV, Figura IV.6) está en equilibrio con la composición  $x_2$  saliente de la misma. Bajo el entorno IV se muestra gráficamente cómo se encuentra parte del líquido retenido, esta retención de líquido es importante para propiciar que el líquido y el gas que se encuentran en este espacio estén en equilibrio. Este espacio, que se encuentra entre dos separaciones físicas, es lo que a la hora de hacer las gráficas de McCabe-Thiele se denomina una *etapa en el equilibrio*<sup>3</sup>.

Se realiza ahora el balance alrededor del Entorno I, Figura IV.6(a). Se realiza un balance de masa al inicio y se sustituye luego la relación de reflujo, ecuación (IV.17), realizando el siguiente desarrollo:

$$\begin{aligned} G &= L + D \\ G &= L_0 + D \\ G &= RD + D \\ G &= D(R + 1) \end{aligned} \tag{IV.26}$$

Se realizó la igualación  $L = L_0$  en las ecuaciones anteriores ya que el reflujo es en realidad el origen de la corriente líquida en la sección de enriquecimiento, y como las corrientes son constantes, ambos flujos son iguales. Luego si se realiza un balance de materia en el Entorno I se obtiene:

$$Gy_4 = Lx_3 + Dx_D$$

<sup>3</sup>Es importante hacer notar que en español también se usa el nombre de *plato* pero se prefiere diferenciar ya que a la separación física entre una etapa y otra también se le denomina *plato*, p.ej. Platos perforados. En ingles no se tiene dilema ya que a uno se le denomina *equilibrium stage* y al otro *tray*.

Este balance aplica de la misma manera para cualquier etapa en la sección de enriquecimiento por lo que se eliminan los subíndices lo que resulta en:

$$Gy = Lx + Dx_D \quad (\text{IV.27})$$

Despejando  $y$  se obtiene una ecuación de una línea recta de la forma  $y = mx + b$  de pendiente  $L/G$  e intercepto  $Dx_D/G$ .

$$y = \frac{L}{G}x + \frac{Dx_D}{G}$$

Sustituyendo luego (IV.17) y (IV.26):

$$y = \frac{RD}{D(R+1)}x + \frac{Dx_D}{D(R+1)}$$

$$y = \frac{R}{R+1}x + \frac{x_D}{R+1} \quad (\text{IV.28})$$

La ecuación (IV.28) sigue siendo la ecuación de una línea recta y es la *línea de operación* de la sección de enriquecimiento. Un punto en esta línea de operación representa las concentraciones de dos corrientes contrarias (una de gas y otra de líquido) por lo que esta línea contiene todos los pares de corrientes posibles pasando de una etapa a la otra, a contracorriente, dentro de la sección de enriquecimiento (Green y Perry, 2008: pp.13-19). Esta línea de operación se presenta gráficamente en la Figura IV.6(b). Su pendiente está dada por  $R/(R+1)$  y el intercepto está dado por  $x_D/(R+1)$ . Esta línea inicia en la línea de 45° ya que las corrientes que van y vienen del condensador tienen la misma concentración ( $x_{L_0} = x_D = y_1$ ) al ocurrir una condensación completa. Para determinar las etapas de equilibrio, construir una *escalera* entre la línea de operación y la curva de equilibrio describe acertadamente la variación teórica de las concentraciones entre etapas (Treybal, 1988). Cada *grada* corresponde a cada etapa en el equilibrio y se numeran consecutivamente, usualmente de mayor a menor concentración<sup>4</sup>.

Escribiendo las ecuaciones correspondientes para la sección de Agotamiento (Balances alrededor del Entorno II) se tiene:

$$\bar{L} = \bar{G} + W$$

$$\bar{L}x_{N_p-3} = \bar{G}y_{N_p-2} + Wx_W$$

Eliminando el subíndice de los platos:

$$\bar{L}x = \bar{G}y + Wx_W \quad (\text{IV.29})$$

Luego despejando para  $y$ :

$$\bar{G}y = \bar{L}x - Wx_W$$

$$y = \frac{\bar{L}}{\bar{G}}x - \frac{W}{\bar{G}}x_W$$

Sustituyendo el balance de masa:

$$y = \frac{\bar{L}}{\bar{L} - W}x - \frac{W}{\bar{L} - W}x_W \quad (\text{IV.30})$$

La ecuación (IV.30) describe la línea de operación de la sección de Agotamiento y describe todos los pares de corrientes posibles, pasando de una etapa a la otra, a contracorriente, dentro de la sección de agotamiento (Green y Perry, 2008: pp.13-19). En la Figura IV.6(c) se representa

<sup>4</sup>La dirección de la numeración es arbitraria ya que pueden ser enumeradas también de menor a mayor concentración, iniciando por la sección de agotamiento, tal y como se realiza en el *Manual del Ingeniero Químico* (Green y Perry, 2008) en las páginas 13-4 y 13-21. En este trabajo se sigue la convención usada por Treybal (1988) y Van Winkle (1967).

dicha línea de operación gráficamente con las etapas correspondientes mediante una graficación en escalera.

Ahora, tal y como se habrá observado, las corrientes (de vapor y líquido) en la sección de enriquecimiento son  $G$  y  $L$  respectivamente, mientras que las de la sección de agotamiento son  $\bar{G}$  y  $\bar{L}$ . Se hace la diferencia entre los flujos de ambas secciones ya que, aunque los flujos de vapor y líquido entre una misma sección son constantes, no son necesariamente iguales entre secciones (Treybal, 1988) debido a que entre una sección y otra se añade la alimentación. La alimentación modifica la pendiente de las líneas de operación (recordar que la pendiente es la razón entre el flujo de líquido y el flujo de vapor). Para calcular este cambio de pendiente es conveniente introducir el término  $q$  cuya relación con el flujo de líquido en las secciones de enriquecimiento y agotamiento está dado por:

$$\bar{L} = L + qF \quad (\text{IV.31})$$

A primera vista se puede ver que si  $q$  toma un valor de 1, el líquido en la sección de agotamiento será el líquido en la sección de enriquecimiento más todo el flujo de alimentación. Si toma un valor de 0, el flujo de líquido es el mismo en la sección de agotamiento que en la de enriquecimiento. Se ampliará más al respecto más adelante.

Si se realiza un balance de masa en el entorno III que es en donde se introduce la alimentación se tiene entonces:

$$L + \bar{G} + F = \bar{L} + G$$

Despejando para  $G$  que es el flujo saliente de vapor hacia la sección de enriquecimiento y sustituyendo (IV.31):

$$G = L + \bar{G} + F - \bar{L}$$

$$G = L + \bar{G} + F - L - qF$$

$$G = \bar{G} + F - qF$$

$$G = \bar{G} + (1 - q)F \quad (\text{IV.32})$$

Como se puede apreciar en la ecuación (IV.32), el flujo de vapor saliente de la etapa en que se realiza la alimentación ( $G$ ) es el flujo que viene desde la sección de agotamiento ( $\bar{G}$ ) más  $(1 - q)$  veces el flujo de alimentación.

El valor de  $q$  representa lo siguiente:

$$q = \frac{\text{Energía a agregar o eliminar para convertir 1 mol de alimentación a vapor saturado}}{\text{Calor latente de la alimentación}}$$

Por lo tanto el valor  $q$  básicamente indica las condiciones térmicas de la alimentación. El calor latente de la alimentación (término en el denominador), el cual está con base en 1 mol de alimentación, se obtiene sencillamente restando la entalpía del vapor saturado y de líquido saturado,  $H_G - H_L$ . Este valor depende únicamente de la concentración de la alimentación. No cambia independientemente de las condiciones térmicas de la alimentación. Por tanto el valor  $q$  depende únicamente del valor del numerador. La energía que se debe agregar o eliminar para convertir 1 mol de alimentación a vapor saturado se puede obtener restando sus entalpías  $H_G - H_F$  en donde  $H_G$  es la entalpía de un vapor saturado a la concentración de alimentación y  $H_F$  es la entalpía de alimentación. Si se alimenta un vapor sobrecalentado, por ejemplo, se requiere eliminar calor para llevarlo a la entalpía de vapor saturado y el numerador de la fracción es negativo. Si se alimenta un vapor saturado, ambas entalpías tienen el mismo valor y el numerador tiene un valor de 0.

$$q = \frac{H_G - H_F}{H_G - H_L} \quad (\text{IV.33})$$

El valor  $q$  toma los siguientes valores en función de las condiciones térmicas de la alimentación:

- Líquido subenfriado:  $q > 1$
- Líquido saturado:  $q = 1$
- Líquido y Vapor:  $0 < q < 1$
- Vapor Saturado:  $q = 0$
- Vapor Sobrecalentado:  $q < 0$

Ahora que se ha visto que en el plato de alimentación se cambian las pendientes de las líneas de operación de la sección de agotamiento y enriquecimiento se puede obtener lo que se llama *la línea  $q$* . Esta curva no representa más que todos los puntos posibles de intersección de ambas curvas de operación. La obtenemos restando las ecuaciones de dichas líneas, pero las originales obtenidas directamente del balance de materia, es decir las ecuaciones (IV.29) y (IV.27):

$$Gy = Lx + Dx_D$$

$$\bar{G}y = \bar{L}x - Wx_W$$

Restando la primera ecuación de la segunda se obtiene:

$$\bar{G}y - Gy = \bar{L}x - Lx - Wx_W - Dx_D$$

$$(\bar{G} - G)y = (\bar{L} - L)x - (Wx_W + Dx_D)$$

Sustituyendo (IV.21) se obtiene:

$$(\bar{G} - G)y = (\bar{L} - L)x - Fz_F \quad (\text{IV.34})$$

Ahora para dejar esta ecuación en términos de  $q$  se modifican algebraicamente las ecuaciones (IV.31) y (IV.32) con lo que se obtiene:

$$\bar{L} - L = qF$$

$$\bar{G} - G = (q - 1)F$$

Sustituyendo luego en (IV.34):

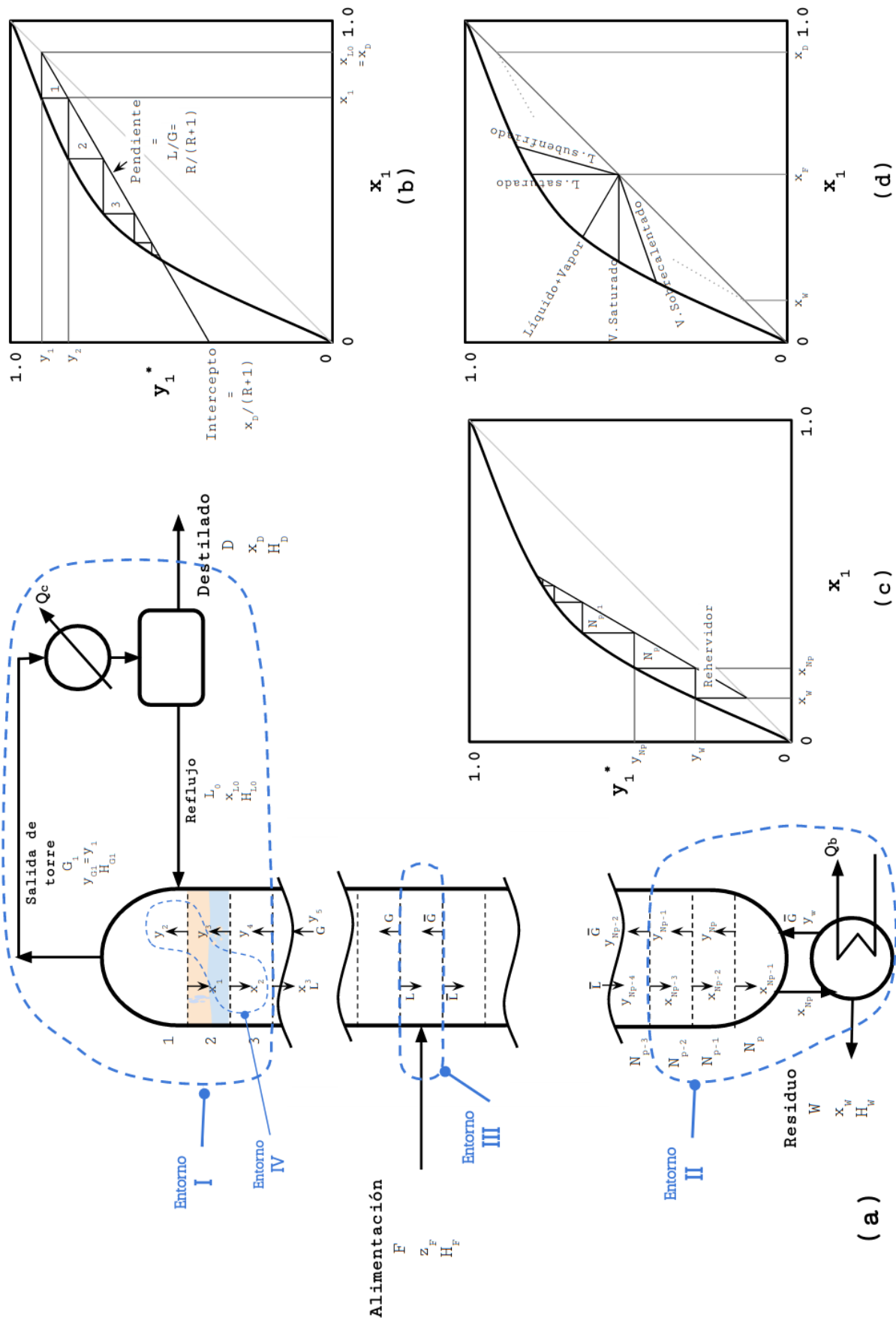
$$(q - 1)Fy = qFx - Fz_F$$

$$y = \frac{qF}{(q - 1)F}x - \frac{Fz_F}{(q - 1)F}$$

$$y = \frac{q}{q - 1}x - \frac{z_F}{q - 1} \quad (\text{IV.35})$$

La ecuación (IV.35) es la ecuación de una recta con pendiente  $q/(q - 1)$  e intercepto  $z_F/(q - 1)$  y es la denominada *línea  $q$*  que se deseaba obtener. Como se había visto que el valor de  $q$  toma diferentes valores dependiendo de las condiciones térmicas de la alimentación, así también la pendiente de esta curva toma diversos valores dependiendo del valor de  $q$ . Se representan gráficamente los casos típicos en la Figura IV.6(d).

Figura IV.6: Balances del método McCabe-Thiele

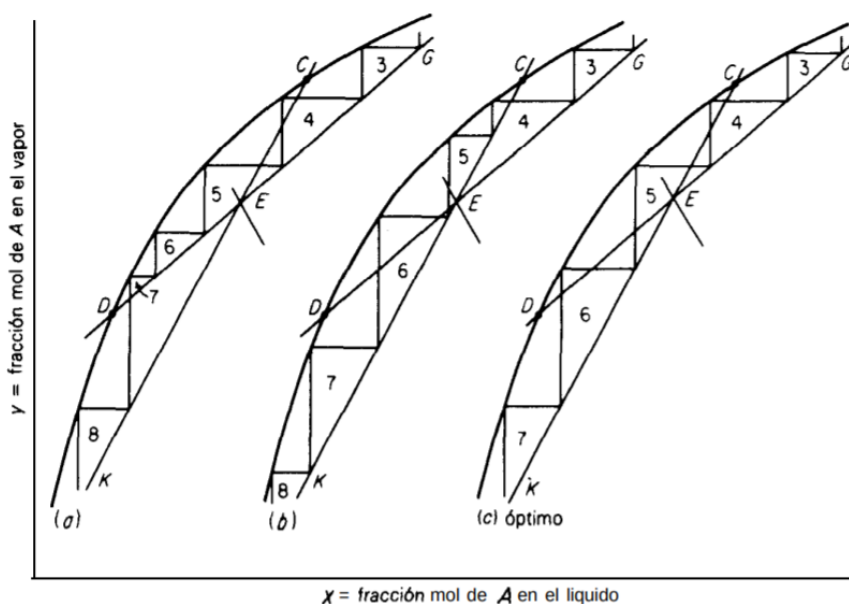


Fuente: Elaboración propia. Adaptado de Treybal (1988)

### b. Localización de la etapa de alimentación

Para concentraciones de destilado ( $x_D$ ) y de residuo ( $x_W$ ) fijas la localización de la etapa de alimentación es aquella que requiere en menor número de etapas para lograr la separación especificada. Esto se logra únicamente cuando se utiliza siempre la línea de operación más lejana a la curva de equilibrio en cada paso (Green y Perry, 2008). El punto en donde se intersectan la curva de enriquecimiento y la de agotamiento con la línea  $q$  es el punto en donde la curva de enriquecimiento pasa de ser la más lejana en la curva de equilibrio a ser la más cercana, por tanto a partir de este punto debe hacerse la transición hacia la curva de Agotamiento en la primera oportunidad. A la hora de diseñar una nueva columna debe de alimentarse en esta etapa en donde ocurre la transición gráfica.

Figura IV.7: Localización de la etapa de alimentación. (a) En la etapa 7, (b) En la etapa 4 y (c) En la etapa 5



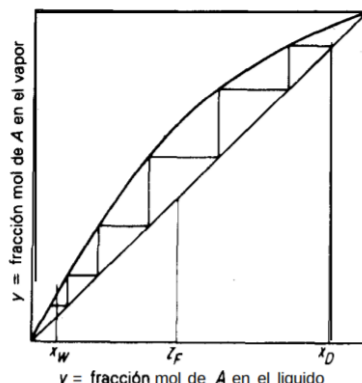
Fuente: Treybal (1988)

En la Figura IV.7 se puede apreciar adecuadamente cómo al realizar la alimentación en otra etapa que no es la etapa óptima. En (a) se muestra que la alimentación se realiza en la etapa 7 por lo que se utiliza la línea de Enriquecimiento hasta la etapa 6 y en la etapa 7 se realiza la transición hacia la línea de agotamiento. Se obtuvieron de esta manera 8 etapas en total. En (b) la transición se realizó muy antes, en la etapa 4 por lo que se obtuvieron también 8 etapas. En (c) se muestra que si se alimenta en la etapa 5, la intersección con la línea  $q$  queda justamente en esta etapa por lo que se hace adecuadamente la transición entre una línea de operación y otra y se obtuvieron menos etapas, 7 etapas en total.

### c. Reflujo total - Número mínimo de etapas

Cuando se aumenta la relación de reflujo (IV.17), las pendientes de las líneas de operación se acercan a 1 cada vez más y se alejan de la curva de equilibrio. Finalmente cuando todo el vapor que sale de la torre se regresa a esta como reflujo se tiene que  $D = 0$  y la relación de reflujo se indefina ( $R = \infty$ ). Como se muestra en la Figura IV.8 las líneas de operación coinciden con la diagonal de  $45^\circ$  y es en esta posición en donde se obtiene el menor número de etapas requeridas para lograr la separación, a la cantidad de platos en esta situación se le denomina *número de etapas mínimas* ( $N_m$ ).

Figura IV.8: Número de etapas mínimas para una columna operando en reflujo total



Fuente: Treybal (1988)

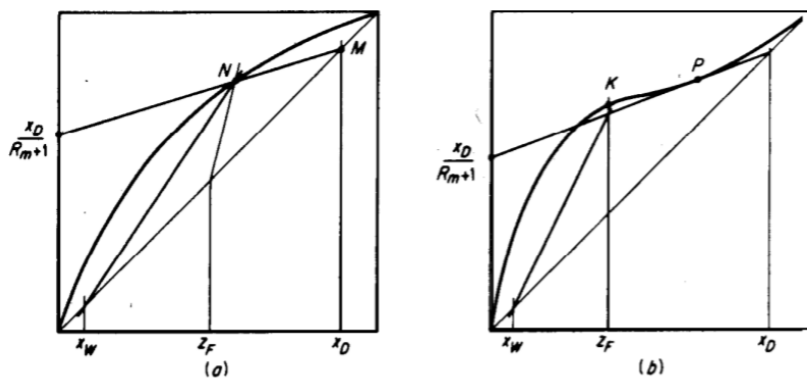
## d. Relación de reflujo mínima

La relación de reflujo mínima  $R_m$  es aquella en la que se requeriría un infinito número de etapas para lograr la separación. Esto ocurre normalmente en el punto en que la línea  $q$  cruza la curva de equilibrio (Figura IV.9 (a)). Sin embargo en algunos casos la curva de equilibrio se acerca a la diagonal de  $45^\circ$  a composiciones mayores por lo que en estos casos la línea de operación superior (sección de enriquecimiento) puede hacer contacto antes que la intersección con la línea  $q$  y la curva de equilibrio ocurra (Green y Perry, 2008). En este caso (Figura IV.9 (b)) el reflujo mínimo se obtiene haciendo tangente la curva de enriquecimiento al equilibrio<sup>5</sup>. Una vez se tiene la curva de enriquecimiento para  $R_m$  se obtiene su intercepto en el eje  $y$ :

$$y_{\text{intercepto}} = \frac{x_D}{R_m + 1}$$

Despejando:

$$R_m = \frac{x_D}{y_{\text{intercepto}}} - 1 \quad (\text{IV.36})$$

Figura IV.9: Casos para reflujo Mínimo: (a) Intersección de la línea  $q$  y (b) Línea de enriquecimiento tangente al equilibrio

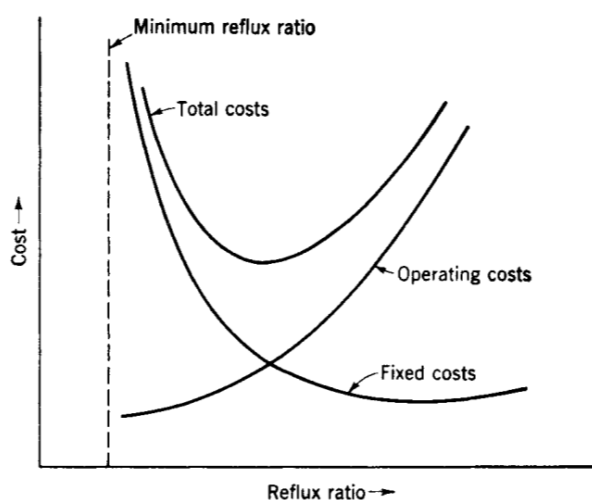
Fuente: Treybal (1988)

<sup>5</sup>Treybal (1988) incluye un caso más en el que la tangencia se encuentra en la sección de agotamiento, sin embargo como Green y Perry (2008) indica que la tangencia ocurre solamente a concentraciones mayores este caso no se incluye.

### e. Relación de reflujo óptima

La relación de reflujo (ecuación (IV.17)) tiene un efecto significativo sobre los costos de operación y los costos fijos. Una relación de reflujo menor, acerca las curvas de operación a la curva de equilibrio y se requieren más etapas en el equilibrio para lograr la separación y, por tanto, la torre debe ser más grande, en este caso los costos fijos son mayores. Una relación de reflujo menor proporciona menos platos sin embargo el costo de operación se incrementa. Una relación general entre  $R$  y los costos fijos, de operación y totales están dados en la Figura IV.10. Entre el reflujo mínimo y el reflujo total existe una relación de reflujo a la que se obtiene un punto mínimo en los costos totales y en ausencia de un análisis de costos para una separación específica es recomendable seleccionar valores de  $R$  entre 1.5 y 2.0 veces  $R_m$  (Green y Perry, 2008).

Figura IV.10: Efecto de la relación de reflujo  $R$  en los costos de separación



Fuente: Green y Perry (2008)

### f. Procedimiento general para McCabe-Thiele

Ahora que ya se tienen los conocimientos básicos del método, del origen de sus ecuaciones y del significado de las líneas de operación en relación a los balances de material, se presenta a continuación un procedimiento general de este método gráfico. La numeración de cada etapa se presenta en la Figura IV.11.

1. Dibujar una línea recta vertical hacia la diagonal en  $x_W$
2. Dibujar también para  $x_F$
3. Repetir para  $x_D$  hasta la diagonal de  $45^\circ$
4. Obtener el valor  $q$  y dibujar la línea  $q$
5. Dibujar la línea de enriquecimiento para  $R_m$ , usar la intersección del equilibrio con la línea  $q$  o la tangencia en caso de que exista. Obtener  $R_m$
6. Calcular a partir de la nueva  $R$  el nuevo intercepto.
7. Dibujar la nueva línea de enriquecimiento
8. Dibujar la línea de agotamiento desde el intercepto enriquecimiento-línea  $q$  hasta  $x_W$ : en la diagonal de  $45^\circ$  en caso de trabajar con rehervidor o en la abscisa ( $y = 0$ ) en caso de trabajar con vapor vivo.
9. Determinar el número de etapas teóricas. Esto puede realizarse iniciando en  $x_W$  y escalonando hacia la parte superior derecha o iniciando en  $x_D$  y escalonando hacia la parte inferior izquierda (AIChE.org, 2017).

Figura IV.11: Procedimiento general para McCabe-Thiele

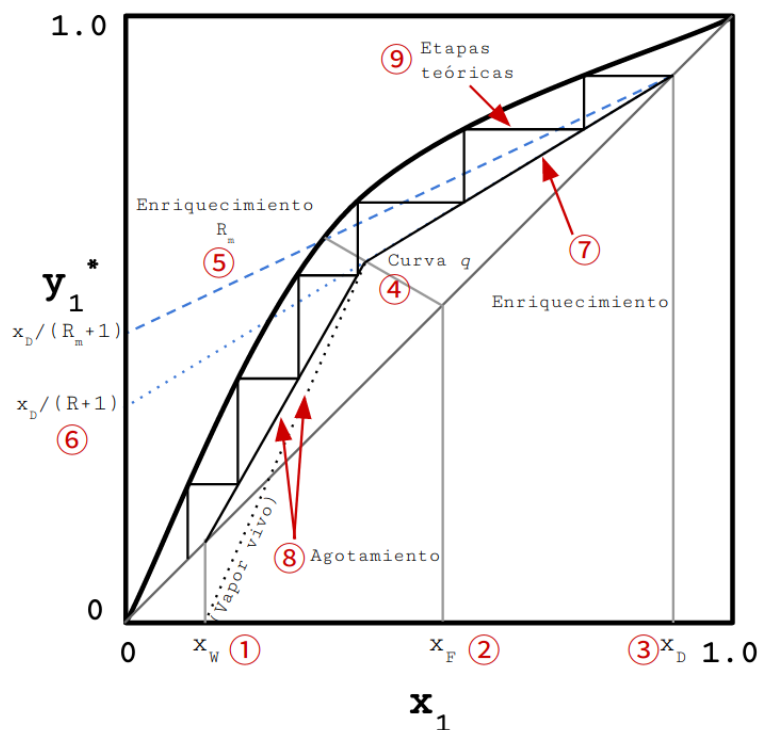
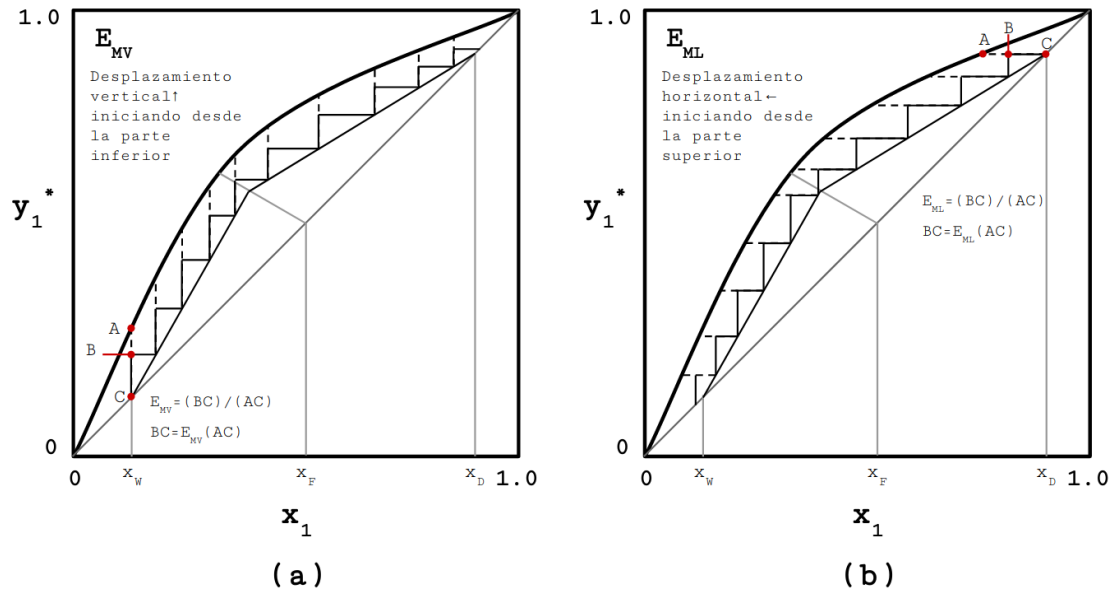


Figura IV.12: Eficiencia de Murphree (a) del vapor y (b) del líquido



## g. Eficiencia de las etapas

En la mayoría de los casos no se alcanza en cada etapa el equilibrio entre la fase gaseosa y la fase líquida por lo cual cada etapa ya no es tan eficiente y se requieren más etapas para lograr la misma separación. El procedimiento de McCabe-Thiele puede hacerse de manera más realista tomando en cuenta lo que se denomina *Eficiencia de Murphree* (Mathias, Dic. 2009). El uso de esta eficiencia resulta conveniente y sencillo de aplicar en los diagramas  $z-y$  (Green y Perry, 2008). El concepto de la eficiencia de Murphree aplica tanto para la fase gaseosa como para la fase líquida. Para la fase de vapor la eficiencia de Murphree del vapor ( $E_{MV}$ ) está dada por (ibíd.):

$$E_{MV} = \frac{y_j - y_{j-1}}{y_j^* - y_{j-1}} \quad (\text{IV.37})$$

La eficiencia de Murphree del líquido está dado por (Mathias, Dic. 2009):

$$E_{ML} = \frac{x_j - x_{j-1}}{x_j^* - x_{j-1}} \quad (\text{IV.38})$$

Esta eficiencia no es más que la razón entre el cambio real en la concentración (del líquido para  $E_{ML}$  o del vapor para  $E_{MV}$ ) de una etapa dada con relación al cambio que ocurriría si se alcanzara el equilibrio de la forma:

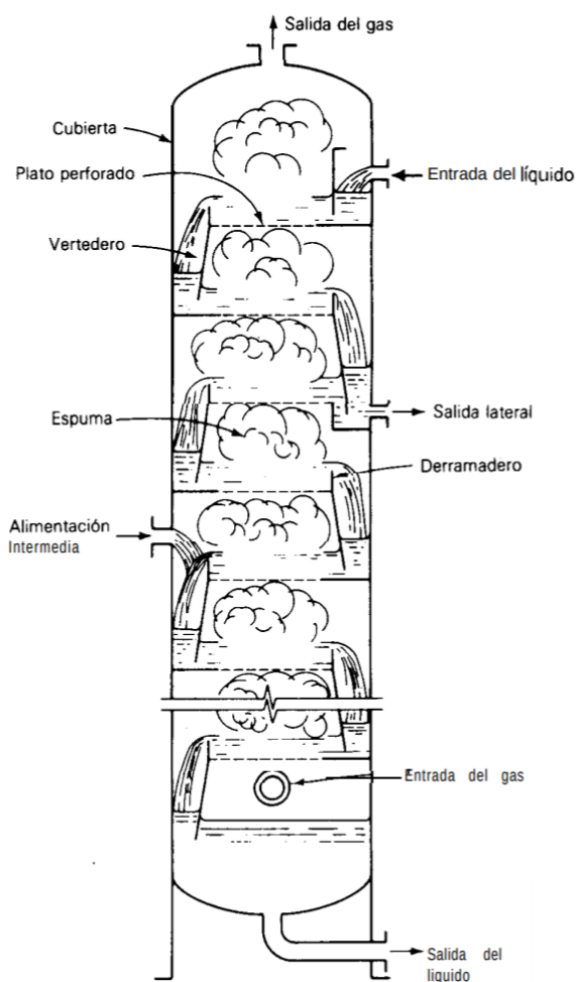
$$E_M = \frac{\text{Cambio Real}}{\text{Cambio en el equilibrio}}$$

En la Figura IV.12 se muestra la forma en que se realiza el procedimiento de escalonado cuando se tiene el valor de la eficiencia. Como se muestra en la Figura IV.12(a) para aplicar la eficiencia del vapor se inicia de la parte inferior en  $x_W$  y se dibuja una línea hacia el equilibrio, el plato real no llegará hasta allí sino que se extenderá proporcionalmente a la eficiencia. Por ejemplo, si en dicho sistema  $E_{MV} = 0.6$  el segmento de recta  $BC$  debe ser 0.6 veces el segmento  $AC$ . Lo mismo aplica para la eficiencia del líquido,  $E_{ML}$  pero en este caso se inicia por la parte superior en  $x_D$  y la eficiencia se mide horizontalmente. Para determinar la proporción se puede hacer analíticamente usando las ecuaciones (IV.37) y (IV.38) o gráficamente midiendo las longitudes de los segmentos de recta (Department of Chemical y Engineering, 2011).

## 8. Equipo para destilación fraccionada

El objetivo del equipo para destilación fraccionada es buscar que las dos fases en contacto, líquido y vapor, alcancen el equilibrio completo, es decir que en cada etapa se alcance una eficiencia del 100 %. Debido a el diseño del equipo, las condiciones de operación y las características del sistema raramente se llega al completo equilibrio, sin embargo algunos dispositivos funcionan de mejor manera obteniendo mayores eficiencias en ciertas condiciones de operación. Los procesos de fraccionamiento convencionalmente se producen en *columnas* o *torres*. A las columnas con divisiones, que propician sectores bien delimitados en los que el líquido y el gas entran en contacto para alcanzar el equilibrio, se les denomina *columnas por etapas* mientras que aquellas que propician un contacto diferencial entre el vapor y el líquido en la superficie de empaques son las llamadas *columnas diferenciales* (Van Winkle, 1967). La principal diferencia entre la columna diferencial y la columna por etapas es que los flujos de líquido y gas deben pasar a contracorriente a través de los mismos espacios, en el caso de la columna diferencial, y en espacios o caminos separados en una columna por etapas (excepto cuando debe entrar en contacto para alcanzar el equilibrio en cada etapa dada). Las columnas diferenciales permiten que el intercambio de masa entre las fases ocurra en cada incremento de altura a través de la columna completa, normalmente en empaques que proveen gran área superficial.

Figura IV.13: Esquema de los flujos en el interior de una columna de platos



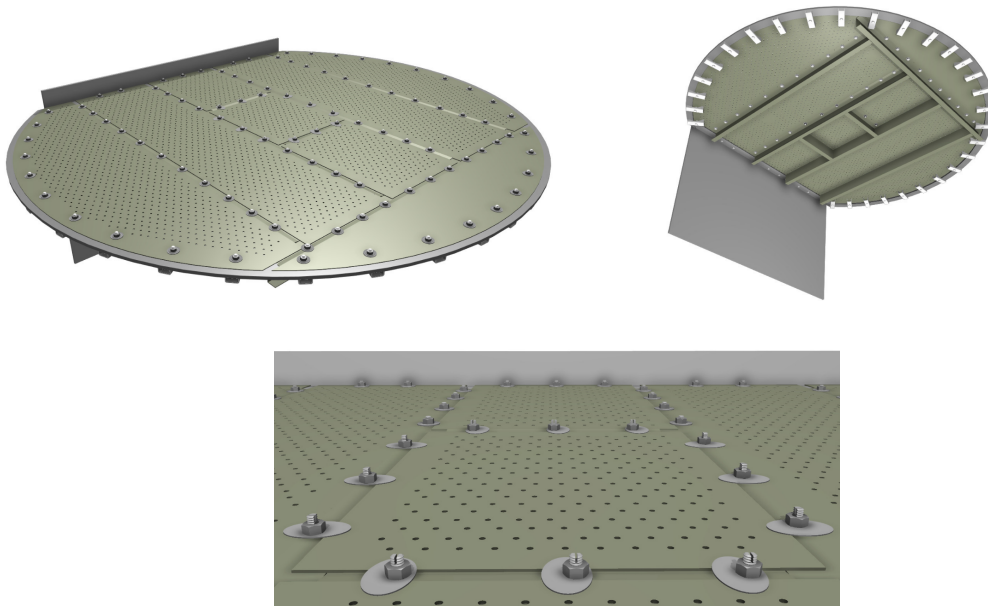
Fuente: Treybal (1988)

En las columnas por etapas, cada etapa mantiene un nivel de líquido definido en el plato mediante represas, cada una posee un conducto o tubería a través del cual el líquido fluye hacia la etapa inferior y el gas fluye hacia la etapa superior a través de espacios en el plato que pueden ser de diferentes formas dependiendo del tipo de plato (Van Winkle, 1967). En la Figura IV.13 se muestra de manera más clara la manera en que fluye el líquido y el vapor a través de la columna. Existe gran variedad de tipos de platos, cada uno de ellos con sus características y condiciones de operación. Entre los más comunes se encuentran:

- **Platos perforados:** Son los platos más sencillos y debido a su sencillez su costo es bastante bajo. El plato consiste principalmente de una hoja horizontal de metal perforada. Es a través de las perforaciones que el gas pasa en forma ascendente. El uso de estos platos limita las condiciones de operación ya que a un flujo muy bajo de gas, este no genera el empuje suficiente en el líquido y en vez de ascender el gas, es el líquido el que inicia a gotear a través de los agujeros. Este tipo de plato se ilustra en la Figura IV.14.
- **Platos de capuchas o campanas de burbujeo:** Este ha sido uno de los platos más utilizados en la industria y es uno de los más antiguos. En la actualidad en las nuevas torres rara vez se encuentra este tipo de plato ya que se han encontrado alternativas más eficientes y que facilitan su mantenimiento sin embargo es común encontrar algunas torres con este tipo de Plato (ibíd.). Una ilustración de este tipo de Plato se puede apreciar en la Figura IV.15. Este plato consiste en un plato plano con *chimeneas* o *elevadores* a través de los cuales el gas sube desde la etapa inferior, luego pasa por debajo de la campana la cual tiene ranuras que separan el flujo de gas en burbujas de menor tamaño que se ponen luego en contacto con el líquido. El líquido acumulado en el plato gracias a las represas debe tener altura suficiente para cubrir total o casi totalmente las campanas. Tiene la ventaja de que es muy amplio el rango de flujos de líquido y gas que pueden manejar, sin embargo son muy costosos de producir (Treybal, 1988).
- **Platos de válvulas móviles:** En estos platos se propicia que las aberturas para el paso del flujo de gas, sean de área variable, es decir que en caso de mayor flujo el área aumente y en caso de menor flujo el área disminuya. Esto se logra colocando piezas metálicas, normalmente circulares sobre los agujeros en la hoja de metal, estas piezas deben tener extensiones metálicas que las mantengan en el plato pero que les permita el movimiento vertical. En la Figura IV.16 se muestra una válvula típica así como la forma en que se ve un plato de válvulas.

Existe gran variedad de tipos de platos los cuales no se abarcan en el presente trabajo. Se abarcan más detalladamente en otros libros de literatura sobre destilación como por ejemplo en el Capítulo 6, *Equipo para las operaciones gas-líquido*, del libro de Treybal (ibíd.) o en el Capítulo 12, *Fractionation devices - equilibrium stages*, del libro de Van Winkle (1967). Mucha información puede obtenerse también a través de proveedores al momento de dimensionar una torre de este tipo. Las columnas de destilación poseen, además de los platos, muchas otras partes estructurales importantes algunas de las cuales se ejemplifican en la Figura IV.17. Estas incluyen entradas para que personas puedan realizar la limpieza de la torre, los soportes de los platos, entre otros.

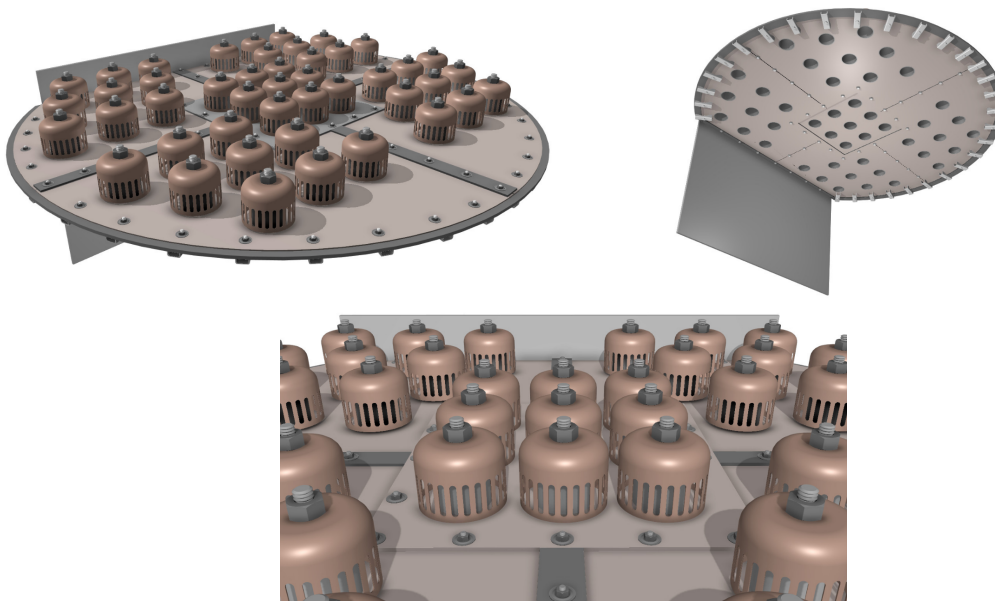
Figura IV.14: Platos perforados



---

Fuente: Frostware FX (2016)

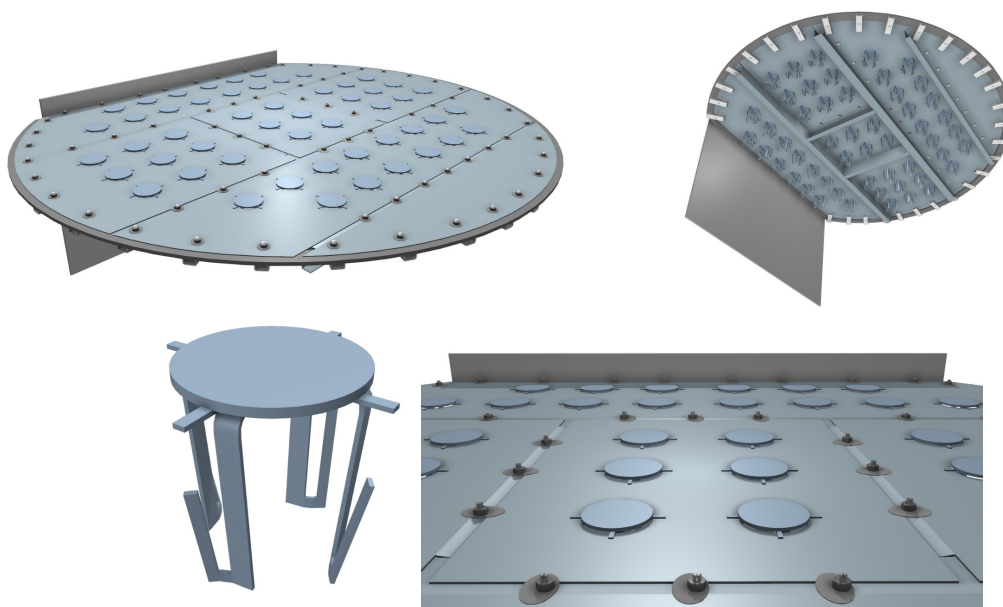
Figura IV.15: Platos de campanas de burbujeo



---

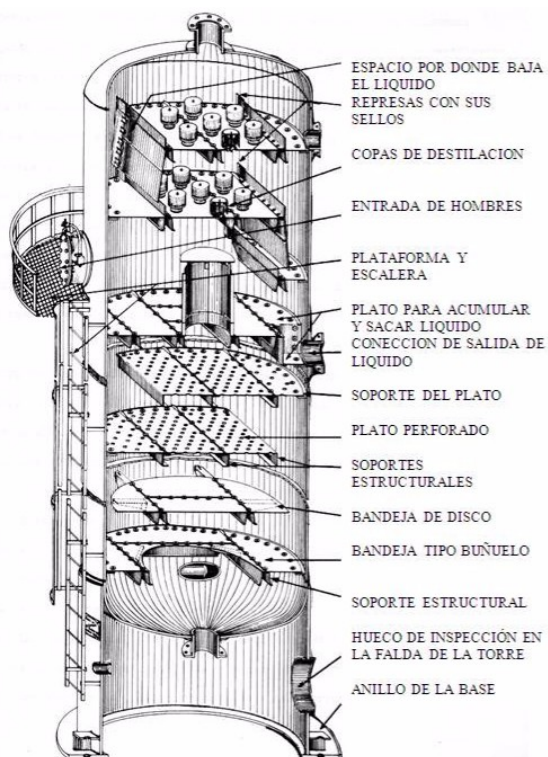
Fuente: Frostware FX (2016)

Figura IV.16: Platos de válvulas móviles



Fuente: Frostware FX (2016)

Figura IV.17: Partes estructurales de una columna de platos



Fuente: Chemical Engineering Images (s.f.)

## B. Uso de hojas de cálculo

Las hojas de cálculo tienen grandes ventajas en la Ingeniería Química ya que son una herramienta que está al alcance de muchas personas. Su versatilidad ha hecho que sean usadas en muchos campos como la contabilidad, administración, salud, ingeniería entre otros. Los ingenieros Químicos tienen a su disposición muchas otras herramientas de software entre las que se encuentran software numérico y de simulación, estas sin embargo están normalmente al alcance solamente de aquellas organizaciones grandes aunque existen algunas opciones gratuitas más sencillas (Clough, Ago. 2016). Todos estos paquetes de simulación implican una curva de aprendizaje independiente, y pueden ser más adecuados para proyectos grandes con varias operaciones unitarias, algunos simuladores incluso pueden facilitar la realización de análisis económicos. Para proyectos pequeños o ingenieros químicos que trabajan en empresas pequeñas las hojas de cálculo son la herramienta más utilizada.

De acuerdo a Clough (ibíd.) son dos los aspectos de las hojas de cálculo los que resultan atractivos para su uso en ingeniería química:

- **Apariencia:** La disposición de la hoja con filas y columnas promueve un entorno de trabajo organizado muy útil en la resolución de problemas. Permite naturalmente crear y utilizar tablas de datos. Es muy útil en el cálculo de corrientes en diagramas de flujo y en la elaboración de balances de masa y energía. La hoja de cálculo permite ver los resultados de los cálculos de manera sencilla mientras que todas las fórmulas no se muestran evitando así confusiones.
- **Funcionamiento:** La hoja de cálculo permite obtener nuevos resultados inmediatamente después de haber cambiado el valor en una celda. Esto facilita a los Ingenieros Químicos, el experimentar con los cálculos y obtener una idea de la sensibilidad de los resultados en relación a varios parámetros.

### 1. Hojas de cálculo de Google

Las hojas de cálculo de Google son una alternativa a las hojas de cálculo de Excel. Utiliza funciones similares algunas de las cuales se detallan en el *Anexo 2*. Presentan algunas ventajas entre las que se encuentran:

- Funcionan desde internet, no están ancladas a ningún ordenador específico por lo que pueden utilizarse desde una oficina y al estarse realizando trabajo de campo se puede trabajar desde el teléfono.
- En conjunto con el sistema de documentos y presentaciones de Google, las hojas de cálculo de Google no requieren que el usuario pague una licencia para utilizarlo.
- Permite el trabajo en equipo por lo que varios compañeros pueden trabajar en el mismo proyecto, en la misma hoja, desde sus computadoras individuales.
- Posee la función de autoguardado por lo que no se pierden los datos al cerrar la hoja
- Posee las mismas funciones que la mayoría de hojas de cálculo y algunas más propias de Google
- Pueden conectarse complementos para ampliar la capacidad de la hoja de cálculo.

### 2. Gráficos en una hoja de cálculo de Google

Un aspecto que es muy importante recalcar es que en Google los gráficos se manejan de forma muy diferente que en las hojas de cálculo de Excel. En Excel para insertar varias series se elijen cuales son los datos  $x$  y cuáles los datos  $y$  de una serie, no importando en dónde se encuentren los datos y esto se repite para cada serie. En Google, sin embargo, la hoja de cálculo toma la primera fila como la referencia en donde se encuentran los títulos de todas las series, y la primera columna la toma como la columna en donde se encuentran los datos de la abscisa. Para esto solamente basta con marcar la tercera y cuarta casilla. Cualquier columna posterior la hoja de cálculo la toma como los

valores  $y$  de cada una de las series. Por ello para graficar varias series, los datos se tienen que colocar en forma escalonada con los valores  $x$  siempre en la primera columna tal y como se muestra en la Figura IV.19. En dicha figura se colorearon cada una de las series para facilitar su identificación. El rango que se inserta para graficar es un rango rectangular y como se puede apreciar en la primera fila de este rango se encuentran todos los títulos aunque los datos de la serie se encuentren varias celdas más abajo. Cualquier celda en blanco no afecta ya que simplemente no se muestra en el gráfico. De esta manera se pueden colocar en una gráfica todas las series que se deseen solamente se debe recordar colocar los valores  $x$  siempre en la misma columna y los valores  $y$  de cada serie en una columna diferente.

Figura IV.18: Vista de una hoja de cálculo de Google

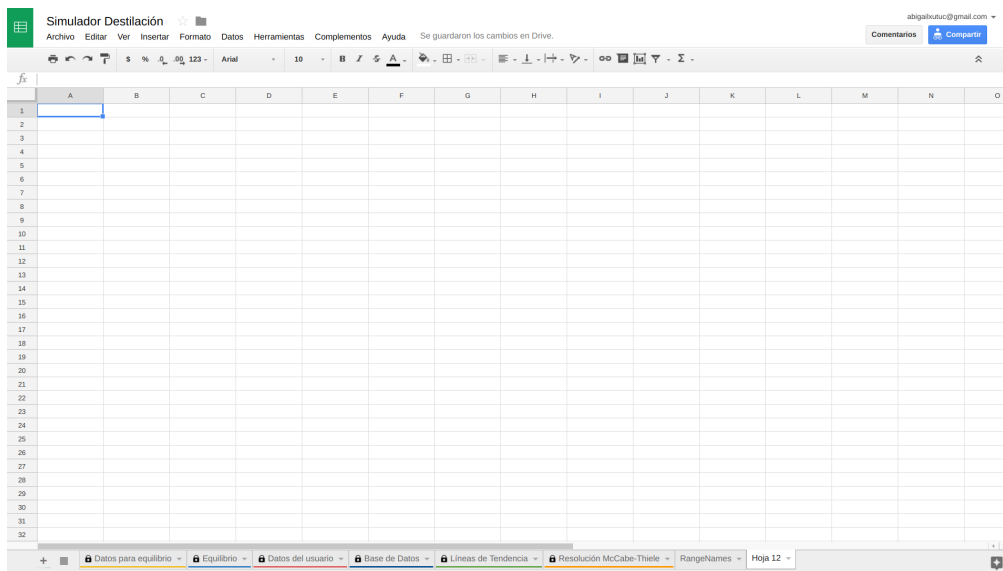
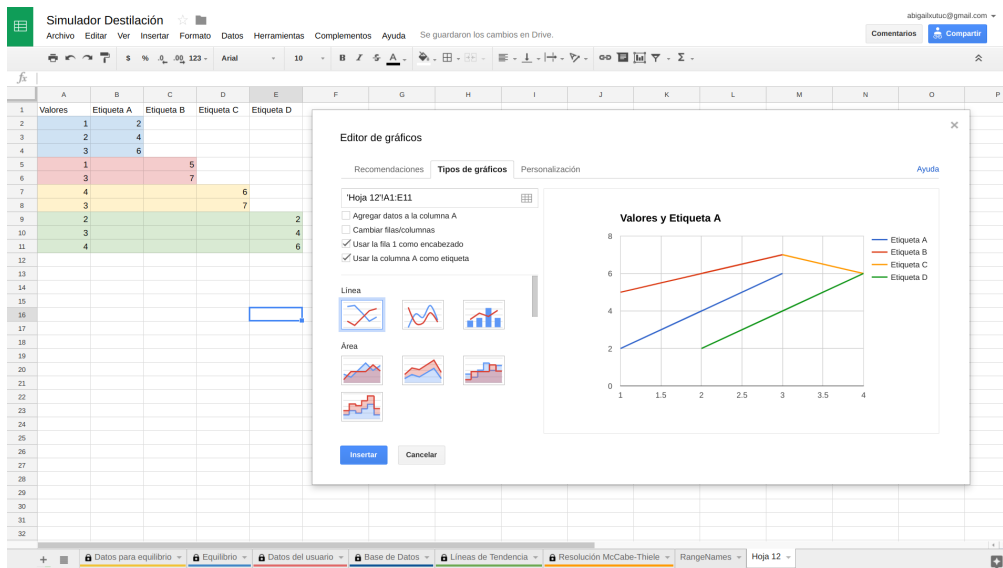


Figura IV.19: Insertar un gráfico en una hoja de cálculo de Google



## V. ANTECEDENTES

El uso del método de McCabe-Thiele es tan importante para la comprensión de la operación de Destilación por etapas que se han realizado varios intentos por trasladar este método gráfico a la computadora para hacerlo un método más rápido y con menos propensión a error, entre estos se encuentran los siguientes:

### A. *Shortcut Distillation Calculations Via Spreadsheets*

- **Tipo:** Artículo. Diciembre 2002, revista CEP
- **Desarrollador:** Jake Jevric de PPG Chemfil y Muhammad E. Fayed de Ryerson University.
- **Descripción:** Este artículo describe la forma en que el Método de McCabe-Thiele puede realizarse en una hoja de cálculo de Excel.
- **Parámetros requeridos:** Constantes de Antoine, de Van Laar,  $x_D$ ,  $x_F$ ,  $x_W$ , valor  $q$  y  $R$ .
- **Aplicación/Características:** En el artículo explican cómo ellos ingresan en la hoja de cálculo todas las fórmulas necesarias para calcular el VLE utilizando la ecuación de Van Laar y la ecuación de Raoult. Obtienen líneas de tendencia para la graficación. Obtienen todas las líneas de operación de McCabe-Thiele, el  $N_p$ , la etapa de alimentación y el  $N_m$ . No hacen uso de ningún valor de eficiencia.
- **Disponibilidad:** No provee el archivo de Excel, solamente el procedimiento para realizarlo.

Figura V.1: Captura de pantalla de la primera página del artículo

Reactions and Separations

## Shortcut Distillation Calculations via Spreadsheets

JAKE JEVRIC,  
PPG CHEMFIL  
MUHAMMAD E. FAYED,  
RYERSON UNIVERSITY

This method uses a numerical solution to a McCabe-Thiele diagram to find the theoretical number of stages for binary and pseudo-binary systems, then calculates the actual number of stages, reflux ratio and column dimensions.

It is often necessary to develop data for a range of operating conditions, so that the optimum configuration of a distillation tower can be found. There are two conventional methods to perform such a task, either graphically by hand (which is some-

tion (apart from performing the mass balance around the column), is determining the vapor/liquid equilibrium (VLE) data. Raoult's law is used to calculate the saturation pressure for the pure components. Since most systems are non-ideal, the Van

## B. *Visualizing the McCabe-Thiele Diagram*

- **Tipo:** Artículo. Diciembre 2009, revista CEP
- **Desarrollador:** Paul M. Mathias de Fluor Corp.
- **Descripción:** En este artículo dan la explicación de una hoja de cálculo realizada por el autor. Explica la forma en que trabaja la hoja de cálculo así como las ventajas del Método de McCabe-Thiele para la comprensión de la operación de destilación.
- **Parámetros requeridos:** Datos del equilibrio Líquido Vapor, composiciones  $x_D$ ,  $x_F$  y  $x_W$ , condición térmica de la alimentación.
- **Aplicación/Características:** Utiliza principalmente las capacidades de cálculo y de graficación básicas de Excel. Incluye una función programada en Visual Basic for Applications (VBA) llamada *Interp*. Dicha función se utiliza para interpolar presiones de vapor y datos de equilibrio  $x$ - $y$ . La hoja de cálculo acepta datos de equilibrio de cualquier fuente. Indican que la hoja de cálculo mencionada incluye dos sistemas como ejemplos de cálculo. Incluyen en la hoja de cálculo el efecto de la Eficiencia de Murphree.
- **Disponibilidad:** Archivo no disponible, se dispone únicamente del artículo<sup>1</sup>.

Figura V.2: Captura de pantalla del artículo

Reactions and Separations

# Visualizing the McCabe-Thiele Diagram

PAUL M. MATHIAS  
FLUOR CORP.

Use this spreadsheet-based visualization and interactive analysis of the McCabe-Thiele diagram to understand the foundations of distillation engineering.

More than 80 years ago, McCabe and Thiele developed a creative graphical solution technique based on Lewis's assumption of constant molar overflow (CMO) for the rational design of distillation columns (1). The McCabe-Thiele diagram enabled decades of effective design and operational analysis of distillation columns, and has been used to teach several generations of chemical engineers to design and troubleshoot distillation and other cascaded processes.

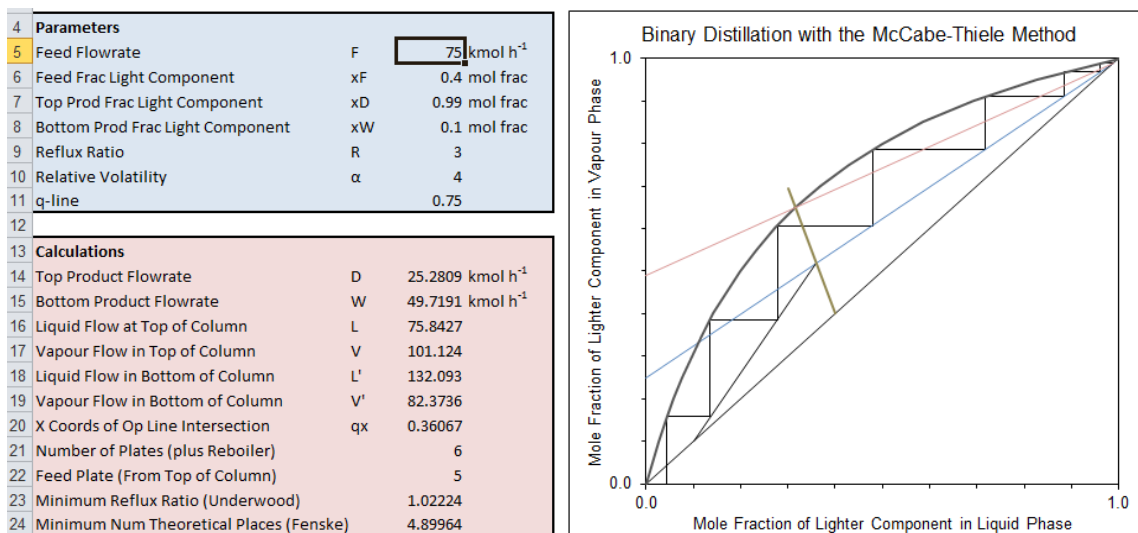
such as composition pinches and unforgiving composition profiles (*i.e.*, a steep peak in the composition profile of one or more components in multicomponent distillation) — until they are converged. For these reasons, textbooks on staged separations stress the visual approach and present the McCabe-Thiele diagram as an essential tool for understanding and analyzing cascaded operations. Experienced process engineers often use McCabe-Thiele diagrams to understand or help debug simulation results (3). Yet some

<sup>1</sup>En el artículo mencionan que el archivo de Excel está disponible en conjunto con la versión en línea de dicho artículo, en la revista CEP. Sin embargo aún teniendo membresía de estudiante en el sitio AICHE.org y teniendo total acceso a la revista CEP no fue posible encontrar el archivo mencionado.

### C. Hoja de cálculo en Excel para destilación binaria

- **Tipo:** Hoja de cálculo de Excel (.xlsx)
- **Desarrollador:** Anónimo
- **Descripción:** Esta hoja de cálculo sencilla permite mediante el ingreso de algunos parámetros, el cálculo del número de etapas teóricas necesarias para una operación de destilación.
- **Parámetros requeridos:** Flujo de alimentación,  $x_F$ ,  $x_D$ ,  $x_W$ ,  $R$ ,  $\alpha$  y el valor  $q$
- **Aplicación/Características:** Calcula el equilibrio con poco detalle ya que utiliza únicamente la volatilidad relativa  $\alpha$ . Permite calcular el flujo de destilado  $D$ , el flujo de residuos  $W$ . Calcula también los flujos de vapor y líquido en las secciones de Enriquecimiento y agotamiento. Calcula el número de etapas y el plato de alimentación numerando desde la parte superior de la columna. Devuelve también los valores de reflujo mínimo  $R_m$  y Número de platos mínimos  $N_m$ .
- **Disponibilidad:** Es posible descargar el archivo desde el sitio en línea:  
<http://excelcalculations.blogspot.com/2012/05/mccabe-thiele-binary-distillation-excel.html>

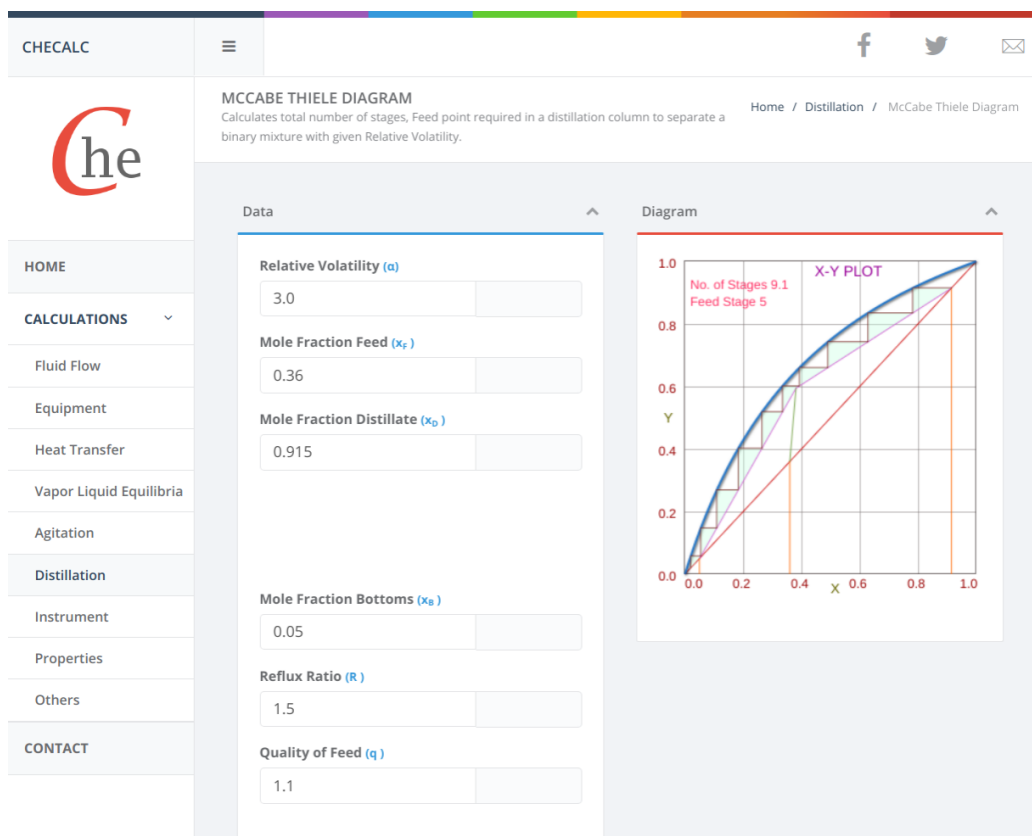
Figura V.3: Hoja de cálculo para destilación binaria



## D. CheCalc: Herramienta en línea

- **Tipo:** Sitio Web
- **Desarrollador:** CheCalc
- **Descripción:** En este sitio Web es posible determinar de forma sencilla el número de etapas requeridas para una operación de destilación.
- **Parámetros requeridos:** Volatilidad relativa ( $\alpha$ ),  $x_F$ ,  $x_D$ ,  $x_W$ ,  $R$  y el valor  $q$ .
- **Aplicación/Características:** Obtiene el equilibrio  $x, y$  a partir de la volatilidad relativa. Devuelve un gráfico en el que se pueden apreciar las etapas teóricas. También devuelve el número de etapas y la etapa de alimentación. No brinda el número de platos mínimos ni es posible ingresar ningún valor de eficiencia.
- **Disponibilidad:** Está disponible en línea de forma permanente en el sitio CheCalc.com para utilizarse directamente.

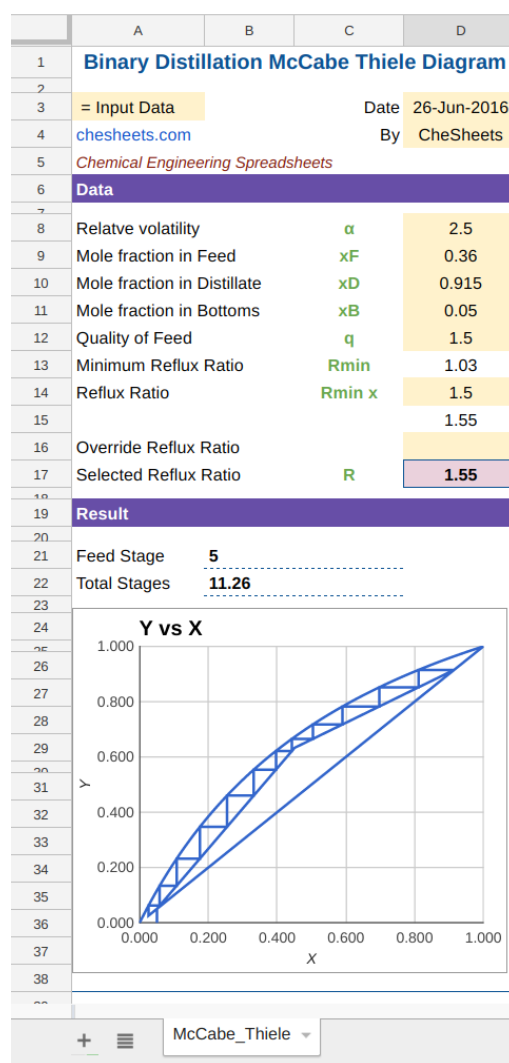
Figura V.4: Captura de la herramienta McCabe-Thiele del sitio CheCalc



### E. CheSheets: Hoja de cálculo en línea

- **Tipo:** Hoja de cálculo de Google
- **Desarrollador:** CheSheets
- **Descripción:** En esta hoja es posible determinar el número de etapas teóricas requeridas para una operación de Destilación.
- **Parámetros requeridos:** Volatilidad relativa ( $\alpha$ ),  $x_F$ ,  $x_D$ ,  $x_W$ ,  $R$  o el número de veces  $R_m$  y el valor  $q$ .
- **Aplicación/Características:** Devuelve un gráfico en el que se pueden apreciar las etapas teóricas. También devuelve el número de etapas y la etapa de alimentación.
- **Disponibilidad:** Está disponible permanentemente en el sitio de CheSheets.com para crear una copia del documento y utilizarlo.

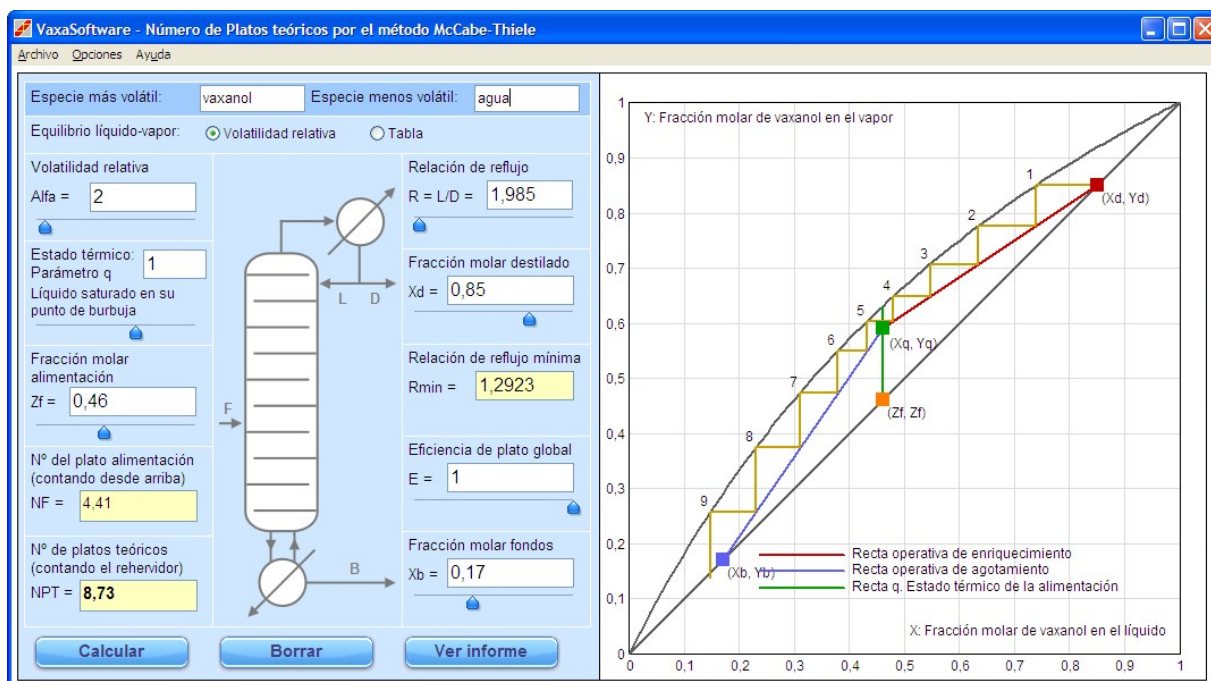
Figura V.5: Hoja de cálculo de Google en donde se resuelve un diagrama de McCabe-Thiele



## F. MCTH - Número de platos teóricos McCabe-Thiele

- **Tipo:** Software para Windows XP, Windows 7, 8 y 10.
- **Desarrollador:** VaxaSoftware
- **Descripción:** Este programa permite calcular una torre de platos mediante el método de McCabe-Thiele
- **Parámetros requeridos:** Volatilidad relativa o seleccionar uno de los sistemas que contiene el programa. El valor  $q$ ,  $x_F$ ,  $x_D$ ,  $x_W$ ,  $R$  y la eficiencia global del plato.
- **Aplicación/Características:** Contiene 47 Tablas con datos de VLE, brinda informes completos e imprimibles con datos y gráfica. Brinda el Número de cada plato sobre la gráfica y permite la edición de tablas propias de VLE. Devuelve el número del plato de alimentación y el número de platos teóricos.
- **Disponibilidad:** El programa debe comprarse para ser utilizado. Es posible descargar una prueba gratuita.

Figura V.6: Captura del programa MCTH de VaxaSoftware



## VI. METODOLOGÍA

Se describen a continuación las actividades realizadas para la culminación del presente trabajo. Una descripción mucho más detallada de cada uno de los procedimientos realizados y de las ecuaciones utilizadas en cada paso para desarrollar la hoja de cálculo puede encontrarse en el *Anexo 1*. Los procedimientos relacionados con la experimentación realizada se presentan en el *Anexo 3*.

### A. Cálculo de los datos de equilibrio líquido-vapor

1. Se realizó primeramente una revisión detallada de la literatura en relación a el tema de equilibrio líquido-vapor y al tema de destilación fraccionada.
2. Se ingresaron en una hoja de cálculo de Google los datos de 19 sistemas binarios necesarios para el cálculo del equilibrio líquido-vapor. Dichos datos fueron obtenidos de los cuadros 13-2 y 13-4 de la 8va. edición del *Manual del Ingeniero Químico* (Green y Perry, 2008).
3. Se configuró en otra hoja del mismo documento la importación de los datos necesarios para calcular el equilibrio líquido vapor del sistema elegido entre los 19 sistemas binarios presentes.
4. Se realizó cuadro en el que se configuraron todas las fórmulas para calcular el equilibrio. Se aplicó la Ley de Raoult Modificada para el cálculo de las concentraciones de equilibrio a la presión del sistema, la ecuación de Antoine para determinar la presión de vapor para cada componente y se aplicó la ecuación y los parámetros de Van Laar para obtener el coeficiente de actividad del sistema, necesario en la ley de Raoult modificada para sistemas no ideales.
5. usando el complemento *Solver* se logró obtener la temperatura ( $T$ ), las concentraciones en el líquido ( $x$ ) y en el vapor en equilibrio ( $y^*$ ) a la presión deseada.
6. Se insertó una gráfica con los datos de equilibrio, obtenidos en el paso anterior, y se verificó que estos fueran correctos comparándolos con datos de la literatura.
7. Teniendo ya la hoja a través de la cual calcular el equilibrio líquido-vapor se procedió a realizar la base de datos.
8. Para realizar la base de datos se calculó, usando *Solver*, el equilibrio para cada uno de los 19 sistemas, primero a una presión de 1 atm la cual es la presión usual en los problemas de los libros de texto y después a una presión de 0.978 atm la cual es la presión promedio del Laboratorio de Operaciones Unitarias de la Universidad del Valle de Guatemala.

### B. Configuración del Método McCabe-Thiele

1. Se añadió una hoja al documento en la cual el usuario pueda ingresar los datos del sistema binario que desee trabajar en caso de que dicho sistema no se encuentre en la base de datos.
2. Se añadió en la base de datos la importación de los datos personalizados ingresados por el usuario.

3. Se crearon dos hojas más en el mismo documento, una denominada *Líneas de tendencia* y la segunda denominada *Resolución McCabe-Thiele* siendo esta última la hoja en la que el usuario deberá ingresar los datos de la destilación que desea realizar.
4. Se creó en la hoja *Resolución McCabe-Thiele* una lista desplegable en la cual el usuario puede elegir uno de los 19 sistemas binarios presentes en la base de datos y otra lista para las presiones.
5. Se configura la importación, específica a cada sistema disponible, de todos los datos necesarios, es decir: Masa molar, coeficientes para el cálculo de las capacidades caloríficas, coeficientes para el cálculo de los calores latentes y los datos de equilibrio desde la Base de datos.
6. Se establecieron los campos que el usuario debe completar con sus datos y se aplicaron los filtros de validación de datos necesarios.
7. Se configuraron las listas necesarias para que el usuario pueda elegir el tipo de destilación (con rehervidor o con vapor vivo), la condición térmica de la alimentación (líquido subenfriado, líquido saturado, mezcla de líquido y vapor, vapor saturado o vapor sobrecalentado) y la temperatura de referencia ( $T_W$ ,  $T_D$  o una temperatura personalizada indicada por el usuario).
8. Se realizó el cálculo de las capacidades caloríficas, calor latente, entalpías y temperaturas de saturación de las soluciones: Alimentación, Residuos, Destilado, Salida de la torre ( $G_1$ ) y, en caso de usar vapor vivo, vapor ingresado.
9. Se configuró la importación de un diagrama diferente en función del tipo de destilación a realizar (Rehervidor o vapor vivo).
10. Se realizó el cálculo del valor  $q$  y reflujo mínimo.
11. Luego en la hoja *Líneas de tendencia* se configuró nuevamente la importación de los datos de equilibrio.
12. Se obtuvieron los coeficientes de dos ecuaciones polinomiales las cuales describen, la primera, la relación  $y^*-x$  y la segunda, la relación  $T-x$ .
13. Se configuraron los cuadros necesarios para realizar la interpolación automática de datos  $x^*$  en función a valores  $y$  específicos.
14. Se crearon las parejas de datos para crear las líneas  $x_D$ ,  $x_W$ ,  $x_F$ , y la curva  $q$ , importando los datos respectivos ingresados por el usuario en la hoja *Resolución McCabe-Thiele* y el valor  $q$  calculado. También se configuraron las parejas de datos para la línea de  $R_m$ .
15. Se insertó en la hoja *Resolución McCabe-Thiele* una gráfica con las líneas que hasta el momento se habían configurado.
16. Se configuró en la hoja *Líneas de tendencia* las parejas de datos para graficar en escalera el número de etapas mínimas, esto se realizó mediante fórmulas específicas insertadas alternadamente<sup>1</sup>.
17. Posteriormente, se configuraron las parejas de datos para graficar el número de etapas escalonadamente utilizando la relación de reflujo y la eficiencia de Murphree especificadas por el usuario en las celdas correspondiente.
18. Se agregaron estas nuevas parejas de datos a la resolución gráfica en la hoja *Resolución McCabe-Thiele*.
19. En esta misma hoja se configuró el conteo del número de etapas teóricas y el número de la etapa de alimentación.

---

<sup>1</sup>La explicación detallada de la elaboración del simulador puede encontrarse en el Anexo 1.

20. Luego se realizó el balance de masa, materia y energía de forma simultánea expresando primero el sistema de ecuaciones de forma matricial, obteniendo luego la matriz inversa de los coeficientes y multiplicándola por el vector de coeficientes de términos independientes para obtener cada una de las incógnitas, es decir  $x = A^{-1}B$ .
21. Luego se configuró que mediante cálculos se obtuvieran los flujos de líquido y vapor para la sección de enriquecimiento ( $L$  y  $G$ ) y para la sección de agotamiento ( $\bar{L}$  y  $\bar{G}$ ).
22. Para completar el simulador se añadió otra hoja en la cual se esquematizó de forma sencilla una columna fraccionada con sus platos y se configuró de manera que tenga el número de platos indicado por el diagrama McCabe-Thiele. Se muestran también en cada plato las composiciones de los flujos que ingresan al plato.
23. Se realizó finalmente el Manual de Usuario del simulador.

## C. Experimentación en el Laboratorio de Operaciones Unitarias

1. Para realizar la experimentación de forma más completa y comprensible para el lector se realizó un modelo 3D de la columna de destilación utilizada, así como de los platos de los que consta dicha columna.
2. Se realizaron los planos correspondientes con base en dichos modelos 3D.
3. Se realizó un listado de las válvulas y la instrumentación presente en la columna, se le asignó código a los elementos que no tenían código. Los elementos que ya tenían código en el software utilizado para controlar la columna se incluyen con el mismo código.
4. Se realizó un diagrama de tuberías e instrumentación (P&ID) de la columna<sup>2</sup>.
5. Se pusieron por escrito los procedimientos a seguir para la experimentación<sup>3</sup>.
6. Se realizaron dos destilaciones con el sistema metanol-agua, a reflujo total, tomando en cada destilación tres conjuntos de 12 muestras (10 platos más una muestra de destilado<sup>4</sup> y una muestra de residuo) y se determinó el índice de refracción de cada muestra.
7. Se realizaron otras tres destilaciones con etanol-agua realizando en cada destilación el mismo procedimiento en la toma de muestras.
8. De acuerdo a los resultados de los índices de refracción, se obtuvieron las concentraciones de cada una de las muestras obtenidas.
9. Se ingresaron los resultados experimentales ( $x_D$  y  $x_W$ ) en el simulador y se determinó el número de platos mínimos requeridos teóricamente.
10. Se obtuvo luego la eficiencia total de la columna ( $E_o$ ) y, para cada plato, la eficiencia de Murphree del líquido ( $E_{ML}$ ) para cada una de las destilaciones.
11. Se ejemplificó de este modo la aplicación del la hoja de cálculo en el Laboratorio de Operaciones Unitarias.

---

<sup>2</sup>Todos los planos y el diagrama P&ID realizado se presentan en el Anexo 4.

<sup>3</sup>Consultar Anexo 3

<sup>4</sup>Es en realidad una muestra de  $L_0$  porque se está trabajando a reflujo total. La muestra, sin embargo, se extrae mediante la tubería del destilado. Se extrae únicamente un volumen pequeño (1.5 mL) para no alterar la operación a reflujo total.

## VII. RESULTADOS

### A. Equilibrios líquido-vapor

#### 1. Hoja de cálculo

Se obtuvo como resultado del presente trabajo una hoja de cálculo en la cual es posible calcular los datos de equilibrio líquido vapor ( $x$ ,  $y^*$  y  $T_{sat}$ ) para 19 sistemas binarios a la presión que el usuario desee. Los sistemas que se pueden trabajar se presentan en el Cuadro VII.1. En la Figura VII.1 se presenta una captura de pantalla de la hoja de cálculo realizada y se muestran ampliada por segmentos en las Figuras VII.2 y VII.3. Se obtuvo también como resultado una base de datos la cual incluye 38 conjuntos de datos de equilibrio, es decir:

- 19 conjuntos de datos VLE a 1 atm.
- 19 conjuntos de datos VLE a 0.987 atm, presión del Laboratorio de Operaciones Unitarias.

Cuadro VII.1: Sistemas binarios presentes en el simulador

---

Sistemas binarios
1-Propanol (1), Agua (2)
2-Propanol (1), Agua (2)
Acetato de etilo (1), Etanol (2)
Acetato de metilo (1), Metanol (2)
Acetona (1), Agua (2)
Acetona (1), Cloroformo (2)
Acetona (1), Metanol (2)
Agua (1), 1-butanol (2)
Agua (1), Ácido Acético (2)
Agua (1), Ácido Fórmico (2)
Cloroformo (1), Metanol (2)
Etanol (1), Agua (2)
Etanol (1), Benceno (2)
Metanol (1), Acetato de etilo (2)
Metanol (1), Agua (2)
Metanol (1), Benceno (2)
n-Hexano (1), Etanol (2)
Tetracloruro de carbono (1), Benceno (2)
Tetrahidrofurano (1), Agua (2)

---

Figura VII.1: Vista general de la hoja configurada para calcular los datos de equilibrio líquido-vapor

## Equilibrio líquido-vapor

Ver manual de usuario en: <http://bit.ly/ManualEq>

---

### Paso 1

Seleccionar el sistema a utilizar:

**Sistema** 1-Propanol (1), Agua (2)

Nota: Las constantes se modifican automáticamente con el sistema

Constantes de Antoine

Componente	Código	A	B	C
1-Propanol	(1)	8.37895	1788.020	227.438
Agua	(2)	8.07131	1730.630	233.426

Parámetros de Van Laar para interacción binaria

A.12	2.9095
A.21	1.1572

### Equilibrio líquido-vapor del sistema

---

### Paso 2

Presión de trabajo

Ingresar la presión de trabajo:

P_trab	1	Atm
	760	Torr
	14.70	Psi

---

### Paso 3

Cálculo de equilibrio a la presión de trabajo

		Presión de saturación				Presión Parcial							
x1	x2	y1	y2	T (°C)	P_1sat (Torr)	P_2sat (Torr)	y1P (Torr)	y2P (Torr)	P_tot (Torr)	P_tot/P_trab	y1	y2	Diagonal 45°
0.00	1.00	18.3476225	1.0000000	99.9969	828.4410145	760.0020994	0.0000000	760.0020994	760.0020994	1.0000	0	1	0.00
0.05	0.95	9.6716615	1.0159299	89.4485	545.1141843	514.3268207	263.6079926	496.3939754	760.0019679	1.0000	0.346853	0.653147	0.05
0.10	0.90	5.9155785	1.0567274	87.7862	509.0186673	482.5045469	301.1198878	458.8882001	760.0021879	1.0000	0.396203	0.603797	0.10
0.15	0.85	4.0387965	1.1154979	87.5928	504.9535117	478.9116497	305.9106679	454.0911875	760.0018554	1.0000	0.402514	0.597486	0.15
0.20	0.80	2.9951801	1.1881346	87.6693	506.5576676	480.3296708	303.4462931	456.5570528	760.0033458	1.0000	0.399271	0.600729	0.20
0.25	0.75	2.3659165	1.2719828	87.7408	508.0605025	481.6578629	300.5071877	459.4963993	760.0025869	1.0000	0.395404	0.604596	0.25
0.30	0.70	1.9622525	1.3651959	87.7616	508.5002694	482.0464765	299.3417699	460.6614976	760.0032675	1.0000	0.393871	0.606129	0.30
0.35	0.65	1.6906802	1.4664041	87.7496	508.2462286	481.8219881	300.7486454	459.2547310	760.0033763	1.0000	0.395722	0.604278	0.35
0.40	0.60	1.5011733	1.5745351	87.7373	507.9672292	481.5931105	305.0307538	454.9711423	760.0018961	1.0000	0.401356	0.598644	0.40
0.45	0.55	1.3652125	1.6887112	87.7579	508.4210964	481.9765145	312.3462775	447.8555204	760.0017979	1.0000	0.410982	0.589018	0.45
0.50	0.50	1.2656512	1.8081896	87.8409	510.1725314	483.5240236	322.8502449	437.1515491	760.0017941	1.0000	0.424803	0.575197	0.50
0.55	0.45	1.1917053	1.9323252	88.0122	513.8038354	486.7314234	336.7665186	423.2353223	760.0020509	1.0000	0.443114	0.556886	0.55
0.60	0.40	1.1363251	2.0605477	88.2952	519.8490936	492.0677216	354.4305345	405.5716104	760.0021448	1.0000	0.466356	0.533644	0.60
0.65	0.35	1.0947455	2.1923462	88.7119	528.8616072	500.0158255	376.3297642	383.6727274	760.0024916	1.0000	0.495171	0.504829	0.65
0.70	0.30	1.0636507	2.3272590	89.2848	541.4660654	511.1169546	403.1515133	358.8504556	760.0019688	1.0000	0.530463	0.469537	0.70
0.75	0.25	1.0406730	2.4648665	90.0380	558.4264174	526.0281088	435.8544735	324.1472636	760.0017372	1.0000	0.573493	0.426507	0.75
0.80	0.20	1.0240835	2.6047860	90.9997	580.7289194	545.5915195	475.7719074	284.2298271	760.0017346	1.0000	0.626016	0.373984	0.80
0.85	0.15	1.0125934	2.7466675	92.2035	609.7061641	570.9377371	524.7767788	235.2264185	760.0031974	1.0000	0.690496	0.309504	0.85
0.90	0.10	1.0052250	2.8901907	93.6921	647.2181767	603.6345531	585.5398902	174.4618998	760.0017901	1.0000	0.770447	0.229553	0.90
0.95	0.05	1.0012239	3.0350624	95.5214	695.9672457	645.9451174	661.9781184	98.0241874	760.0023058	1.0000	0.871024	0.128976	0.95
1.00	0.00	1.0000000	3.1810140	97.7668	760.0016289	701.2358964	760.0016289	0.0000000	760.0016289	1.0000	1.000002	-0.000002	1.00

! Aquí no es necesario modificar los valores de x

! Con el complemento "Solver" se modifica cada celda T (°C) de la columna E, teniendo como celda objetivo la celda correspondiente P\_tot/P\_trab en la columna K, ajustándola a un valor de 1.0 (Método Standard LSQR Non linear)

Puedes instalar el complemento desde el siguiente enlace:  
[https://chrome.google.com/webstore/detail/solver/ismnicfckkksiflbcmsahildohp?utm\\_source=personalink](https://chrome.google.com/webstore/detail/solver/ismnicfckkksiflbcmsahildohp?utm_source=personalink)

Figura VII.2

Figura VII.3

Figura VII.2: Detalle del ingreso de datos para calcular los datos de equilibrio líquido-vapor

## Equilibrio líquido-vapor

Ver manual de usuario en: <http://bit.ly/ManualEq>

**Paso 1**  
 Seleccionar el sistema a utilizar:  
**Sistema** 1-Propanol (1), Agua (2) ▼

Nota: Las constantes se modifican automáticamente con el sistema

**Constantes de Antoine**

Componente	Código	A	B	C
1-Propanol	(1)	8.37895	1788.020	227.438
Agua	(2)	8.07131	1730.630	233.426

**Parámetros de Van Laar para interacción binaria**

A_12	2.9095
A_21	1.1572

**Paso 2 Presión de trabajo**  
 Ingresar la presión de trabajo:

P_trab	1	Atm
	760	Torr
	14.70	Psi

**Equilibrio líquido-vapor del sistema**

Figura VII.3: Detalle del cuadro en el que se obtiene el equilibrio líquido-vapor

**Cálculo de equilibrio a la presión de trabajo**

				Presión de saturación				Presión Parcial							
x1	x2	y1	y2	T (°C)	P <sub>1sat</sub> (Torr)	P <sub>2sat</sub> (Torr)	y1P (Torr)	y2P (Torr)	P <sub>tot</sub> (Torr)	P <sub>totP</sub> (Torr)	y1	y2	Diagonal 45°		
0.00	1.00	18.3476225	1.0000000	99.9969	828.4410145	760.0020994	0.0000000	760.0020994	760.0020994	760.0020994	1.0000	0	1		
0.05	0.95	9.6716615	1.0159299	89.4485	545.1141843	514.3268207	263.6079926	496.3939754	760.0019679	760.0019679	1.0000	0.346853	0.653147		
0.10	0.90	5.9155785	1.0567274	87.7862	509.0186673	482.5045469	301.1139878	458.8882001	760.0021879	760.0021879	1.0000	0.396203	0.603797		
0.15	0.85	4.0387965	1.1154979	87.5928	504.9535117	478.9116497	305.9106679	454.0911875	760.0018554	760.0018554	1.0000	0.402514	0.597486		
0.20	0.80	2.9951801	1.1881346	87.6693	506.5576676	480.3296708	303.4462931	456.5570528	760.0033458	760.0033458	1.0000	0.399271	0.600729		
0.25	0.75	2.3659165	1.2719828	87.7408	508.0605025	481.6578629	300.5071877	459.4953993	760.0025869	760.0025869	1.0000	0.395404	0.604596		
0.30	0.70	1.9622525	1.3651959	87.7616	508.5002694	482.0464765	299.3417699	460.6614976	760.0032675	760.0032675	1.0000	0.393871	0.606129		
0.35	0.65	1.6908802	1.4664041	87.7496	508.2462286	481.8219881	300.7486454	459.2547310	760.0033763	760.0033763	1.0000	0.395722	0.604278		
0.40	0.60	1.5011733	1.5745351	87.7373	507.9872292	481.5931105	305.0307538	454.9711423	760.0018961	760.0018961	1.0000	0.401356	0.598644		
0.45	0.55	1.3652125	1.6887112	87.7579	508.4210964	481.9785145	312.3462775	447.6555204	760.0017979	760.0017979	1.0000	0.410982	0.589018		
0.50	0.50	1.2656512	1.8081896	87.8409	510.1725314	483.5240236	322.8502449	437.1515491	760.0017941	760.0017941	1.0000	0.424803	0.575197		
0.55	0.45	1.1917053	1.9323252	88.0122	513.8038354	486.7314234	336.7665186	423.2355323	760.0020509	760.0020509	1.0000	0.443114	0.556886		
0.60	0.40	1.1363251	2.0605477	88.2952	519.8490936	492.0677216	354.4305345	405.5716104	760.0021448	760.0021448	1.0000	0.466356	0.533644		
0.65	0.35	1.0947455	2.1923462	88.7119	528.8616072	500.0158255	376.3297642	383.6727274	760.0024916	760.0024916	1.0000	0.495171	0.504829		
0.70	0.30	1.0636507	2.3272590	89.2848	541.4660654	511.1169546	403.1515133	356.8504556	760.0019688	760.0019688	1.0000	0.530463	0.469537		
0.75	0.25	1.0406730	2.4648665	90.0380	558.4264174	526.0281088	435.8544735	324.1472636	760.0017372	760.0017372	1.0000	0.573493	0.426507		
0.80	0.20	1.0240835	2.6047860	90.9997	580.7289194	545.5915195	475.7719074	284.2298271	760.0017346	760.0017346	1.0000	0.626016	0.373984		
0.85	0.15	1.0125934	2.7466675	92.2035	609.7061641	570.9377371	524.7767788	235.2264185	760.0031974	760.0031974	1.0000	0.690496	0.309504		
0.90	0.10	1.0052250	2.8901907	93.6921	647.2181767	603.6345531	585.5398902	174.4618998	760.0017901	760.0017901	1.0000	0.770447	0.229553		
0.95	0.05	1.0012239	3.0350524	95.5214	695.9672457	645.9451174	661.9781184	98.0241874	760.0023058	760.0023058	1.0000	0.871024	0.128976		
1.00	0.00	1.0000000	3.1810140	97.7668	760.0016289	701.2358964	760.0016289	0.0000000	760.0016289	760.0016289	1.0000	1.000002	-0.000002		

† Aquí no es necesario modificar los valores de x

† Con el complemento "Solver" se modifica cada celda T (°C) de la columna E, teniendo como celda objetivo la celda correspondiente P<sub>tot</sub>/P<sub>trab</sub> en la columna K, ajustandola a un valor de 1.0 (Método Standard LSQR Non linear)

Puedes instalar el complemento desde el siguiente enlace:

[https://chrome.google.com/webstore/detail/solver/iennicichkeiaifibcmaachildohpb7utm\\_source=permalink](https://chrome.google.com/webstore/detail/solver/iennicichkeiaifibcmaachildohpb7utm_source=permalink)

## 2. Resultados de la hoja de cálculo

A continuación se detallan los elementos que se obtienen como resultado en la hoja de cálculo desarrollada.

Cuadro VII.2: Elementos que puede visualizar y obtener en la simulación del equilibrio

Elementos en la hoja de cálculo de equilibrio	
Constantes de Antoine	$A, B$ y $C$
Parámetros de Van Laar	$A_{12}$ y $A_{21}$
Presión de trabajo	$P$
Composiciones molares en el líquido	$x_1$ y $x_2$
Coefficientes de Actividad	$\gamma_1$ y $\gamma_2$
Temperaturas de equilibrio en °C	$T$
Presiones de saturación	$P_1^{sat}$ y $P_2^{sat}$
Presiones parciales	$\bar{p}_1$ y $\bar{p}_2$
Composiciones molares en el vapor	$y_1$ y $y_2$
Diagrama $x$ - $y$ del equilibrio	

## 3. Acceso a la hoja de cálculo

El resultado de este trabajo es esta hoja de cálculo funcional que se encuentra en línea para consultarse, utilizarse directamente y/o crear una copia propia. Puede ingresar a la hoja de cálculo en el siguiente enlace:

<http://bit.ly/SDest>

O escaneando el siguiente código QR:

Figura VII.4: Código QR para ingreso al simulador



Se creó también una versión similar adaptada a Excel la cual puede descargarse del enlace <http://bit.ly/SDestZip> para usarse en Office.

## B. Método McCabe-Thiele

### 1. Hoja de cálculo

Se obtuvo como resultado una hoja de cálculo con la cual es posible resolver el método McCabe-Thiele completamente, incluyendo la resolución gráfica. Con esta hoja de cálculo se puede calcular cualquier sistema binario ya que incluye 19 sistemas comúnmente utilizados, y en caso de requerirse otro sistema, el usuario puede ingresar sus datos de equilibrio y posteriormente resolver el método. Se presenta en la Figura VII.5 una captura de pantalla de la hoja de cálculo y en las figuras posteriores se amplía cada sección.

Figura VII.5: Vista general de la hoja para resolución de sistemas binarios mediante McCabe-Thiele

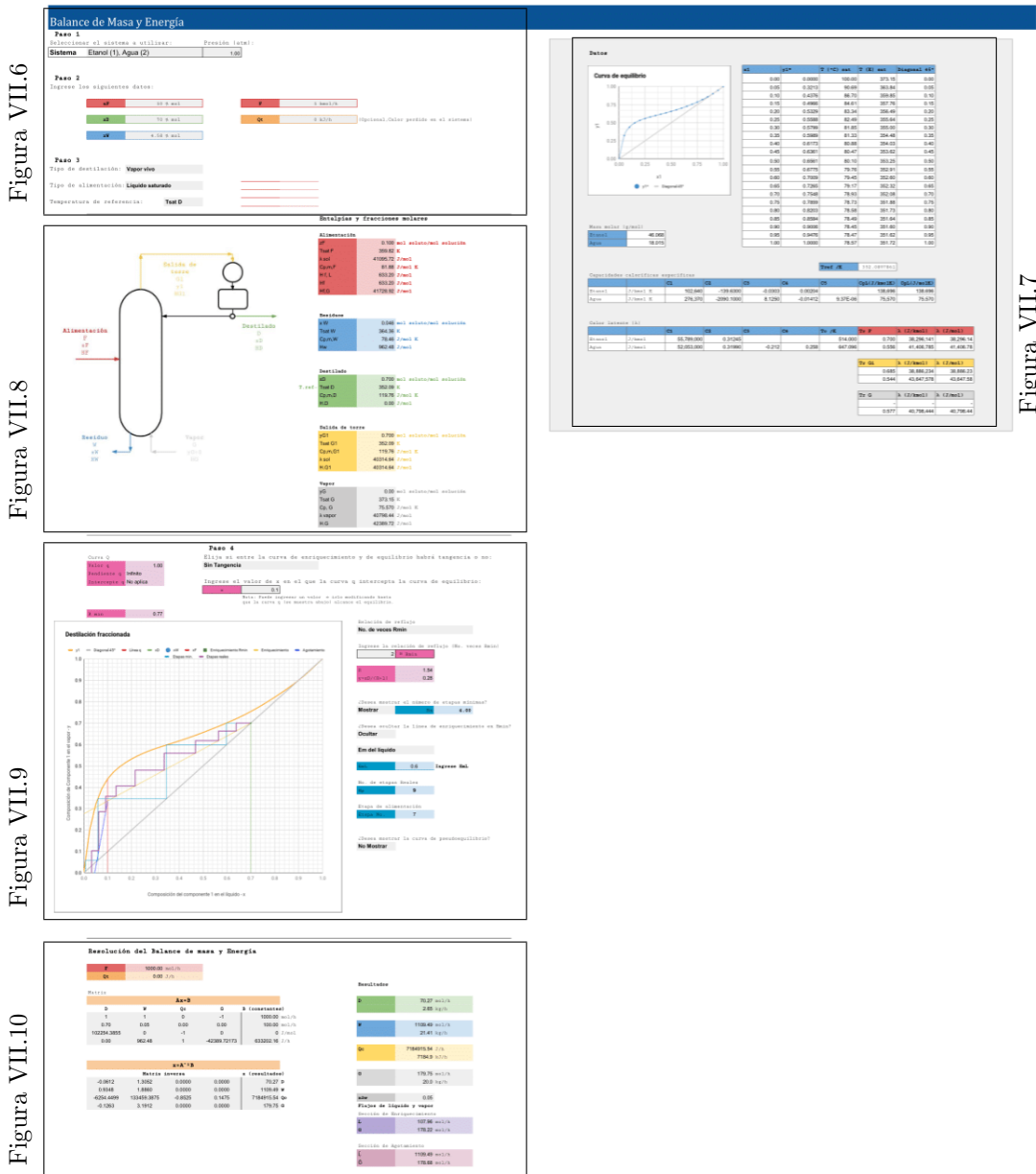


Figura VII.6: Detalle del ingreso de datos para resolución mediante McCabe-Thiele

## Balance de masa y energía

Ver manual de usuario en: <http://bit.ly/ManualMcCabe>

**Paso 1**  
 Seleccionar el sistema a utilizar: Presión (atm):

<b>Sistema</b> Etanol (1), Agua (2) ▾	Presión (atm): 0.98 ▾
---------------------------------------	-----------------------

**Paso 2**  
 Ingrese los siguientes datos:

<b>zF</b>	10 % mol ▾	<b>F</b>	100 kmol/h ▾
<b>xD</b>	70 % mol ▾	<b>Qt</b>	0 kJ/h ▾ <small>(Opcional, Calor perdido en el sistema)</small>
<b>xW</b>	4.58 % mol ▾		

**Paso 3**

Tipo de destilación: Vapor vivo ▾

Tipo de alimentación: Líquido saturado ▾

Temperatura de referencia: Tsat D ▾

---



---



---



---

Figura VII.7: Detalle de los datos importantes para el método McCabe-Thiele

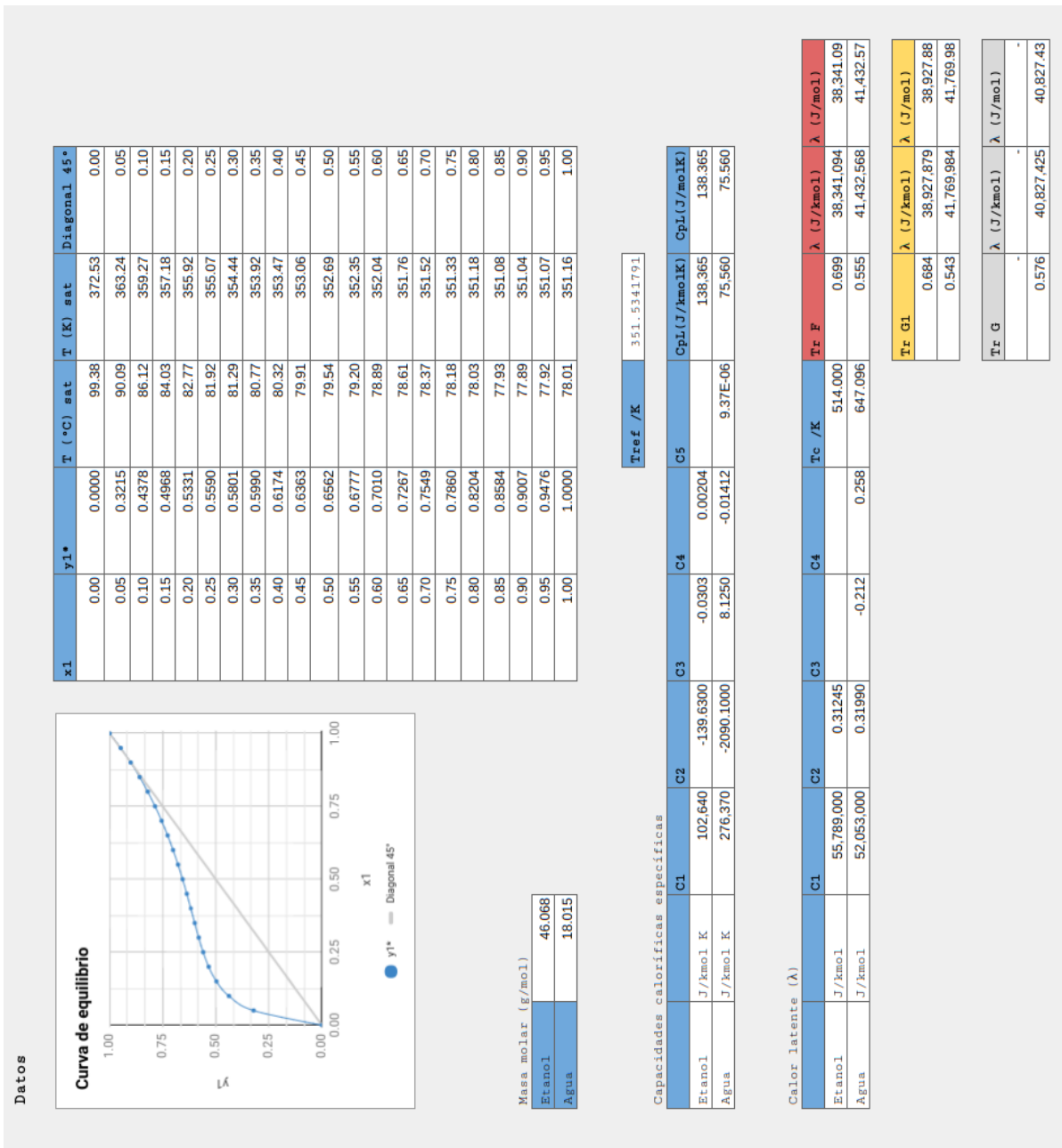


Figura VII.8: Detalle de la especificación de las corrientes en la hoja de McCabe-Thiele

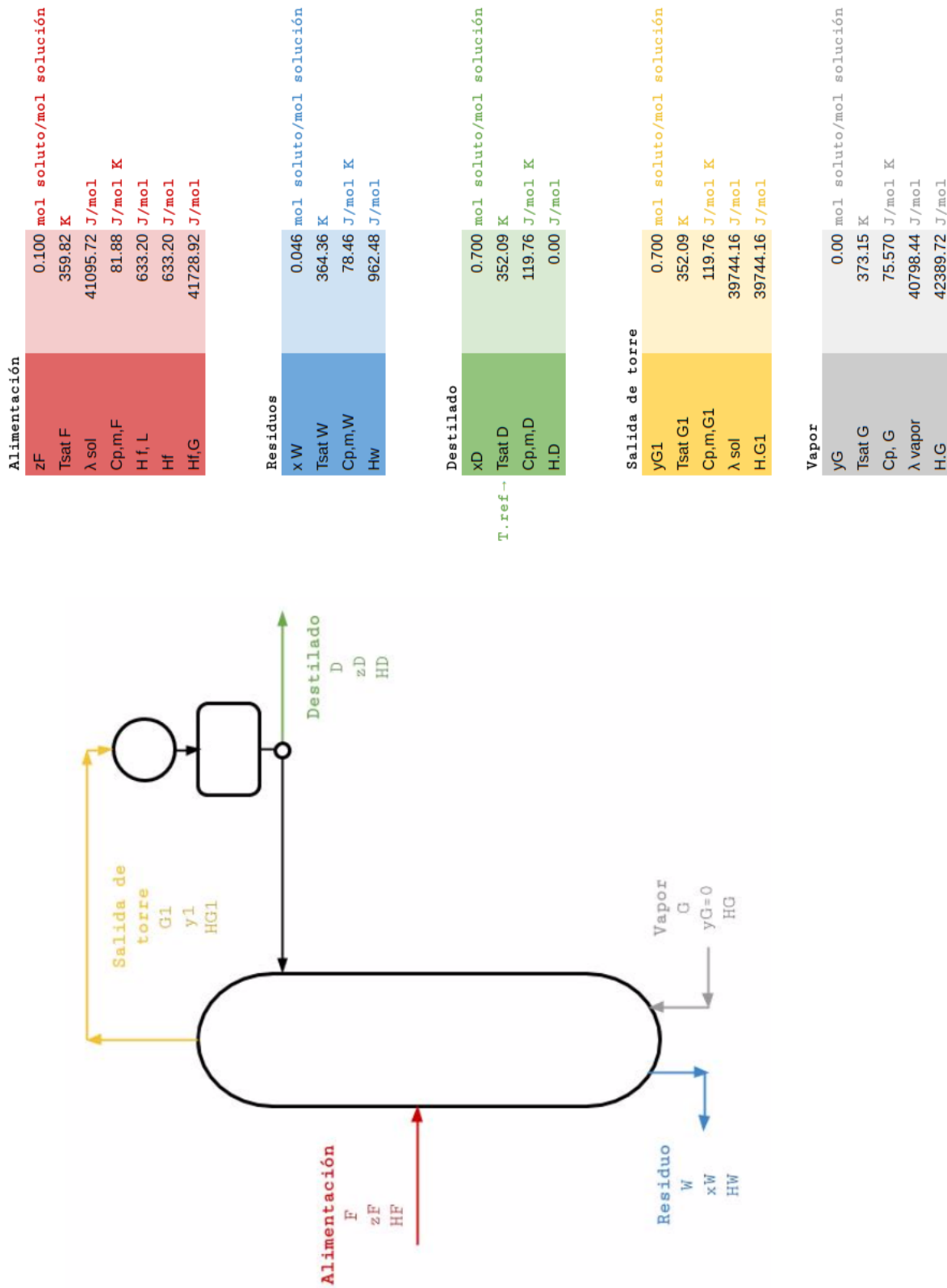


Figura VII.9: Detalle de la resolución gráfica realizada mediante McCabe-Thiele

**Paso 4**

Elija si entre la curva de enriquecimiento y de equilibrio habrá tangencia o no:

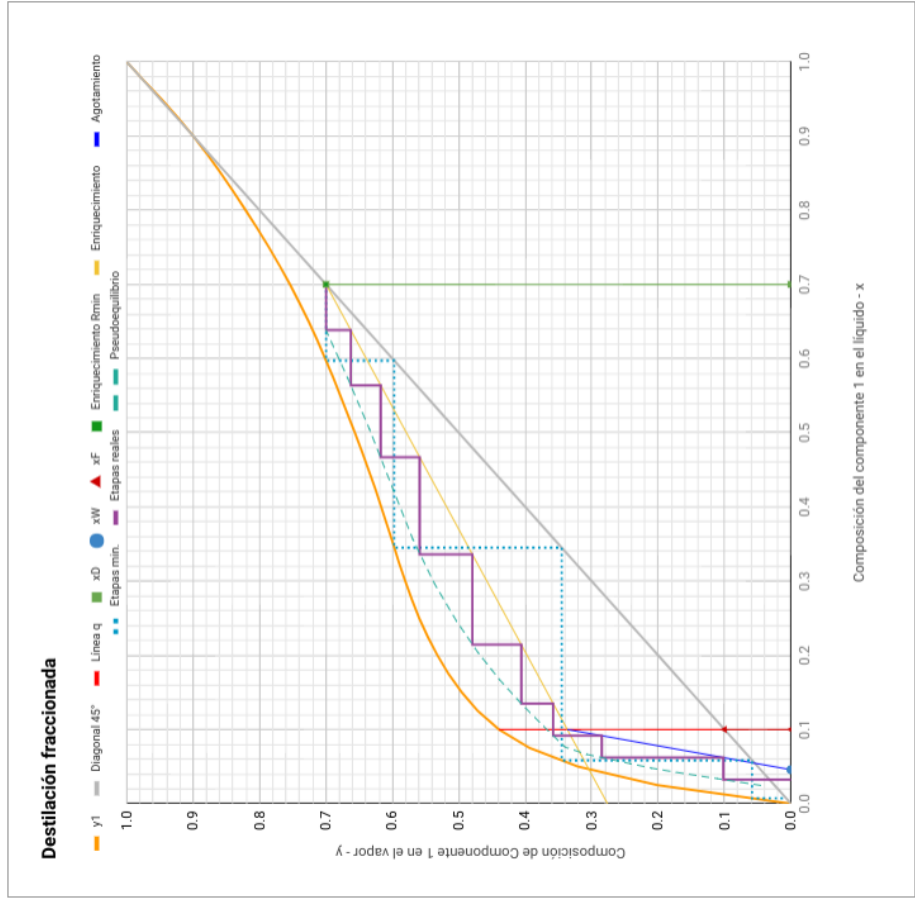
**Sin Tangencia**

Ingrese el valor de x en el que la curva q intercepta la curva de equilibrio:

x

Nota: Puede ingresar un valor e irlo modificando hasta que la curva q (se muestra abajo) alcance el equilibrio.

R min



Relación de reflujo

**No. de veces Rmin**   Rmin

Ingrese la relación de reflujo (No. veces Rmin)

R

$y=xD/(R+1)$

¿Desea mostrar el número de etapas mínimas?

**Mostrar**

¿Desea ocultar la línea de enriquecimiento en Rmin?

**Ocultar**

**Em del líquido**

**EnL**  **Ingreso EnL**

No. de etapas Reales

Etapas de alimentación

**Etapas No.**

¿Desea mostrar la curva de pseudoequilibrio?

**Mostrar**

Figura VII.10: Detalle del balance de masa y energía brindado por la hoja desarrollada

### Resolución del balance de masa y energía

F	100000.00 mol/h
Qt	0.00 J/h

Matriz

Ax=B					
D	W	Qc	G	B (constantes)	
1	1	0	-1	100000.00	mol/h
0.70	0.05	0.00	0.00	100000.00	mol/h
100817.6183	0	-1	0	0	J/mol
0.00	959.14	1	-42413.68	63088439.09	J/h

$$x = A^{-1} B$$

Matriz inversa					
x (resultados)					
-0.0613	1.3080	0.0000	0.0000	7041.92	D
0.9368	1.8428	0.0000	0.0000	110712.98	W
-6179.3590	131869.4224	-0.8543	0.1457	709949846.9	Qc
-0.1245	3.1508	0.0000	0.0000	17754.90	G

### Resultados

D	7041.92 mol/h
	265.14 kg/h
W	110712.98 mol/h
	2136.74 kg/h
Qc	709949846.9 J/h
	709949.8 kJ/h
G	17754.90 mol/h
	1994.5 kg/h
xAw	0.05
Flujos de líquido y vapor	
Sección de enriquecimiento	
L	10804.75 mol/h
G	17846.68 mol/h
Sección de agotamiento	
L	110712.98 mol/h
G	17819.42 mol/h

## 2. Resultados de la hoja de cálculo

A continuación se detallan los elementos que la hoja de cálculo brinda como resultado al utilizarse:

Cuadro VII.3: Resultados brindados por la hoja de cálculo para el método McCabe-Thiele

Resultados de la resolución de McCabe-Thiele en la hoja de cálculo	
Especificación de las corrientes:	
Composición	$x$
Temperatura de saturación	$T^{sat}$
Capacidad calorífica promedio	$C_{pL,m}$
Calor latente de la solución (si es necesaria)	$\lambda_{sol}$
Entalpía de la solución	$H_{sol}$
Valor $q$	$q$
Pendiente e intercepto de la curva $q$	$m_q$ y $b_q$
Relación de reflujo mínima	$R_{min}$
Relación de reflujo utilizada	$R$
Número de etapas mínimas	$N_m$
Número de etapas reales	$N_p$
Etapa de alimentación	
Diagrama $x-y$ con:	
Curva de equilibrio	
Diagonal de 45°	
Curva $q$	
Línea de enriquecimiento para $R_{min}$	
Línea de enriquecimiento	
Línea de agotamiento	
Etapas mínimas escalonadas	
Etapas reales escalonadas	
Curva de pseudoequilibrio	
Flujo de destilado en mol/h y kg/h	$D$
Flujo de residuo en mol/h y kg/h	$W$
Carga térmica del condensador en J/h y kJ/h	$Q_c$
Flujo de Vapor entrante si se usa vapor vivo	$G$
Carga térmica del rehornador, si se usa éste	$Q_b$
Flujo de líquido en la sección de enriquecimiento	$L$
Flujo de vapor en la sección de enriquecimiento	$G$
Flujo de líquido en la sección de agotamiento	$\bar{L}$
Flujo de vapor en la sección de agotamiento	$\bar{G}$

## 3. Acceso a la hoja de cálculo

La hoja de cálculo para resolver el método de McCabe-Thiele es la misma que para obtener el equilibrio, solamente son pestañas diferentes. Al igual que se especificó antes, puede descargarse en el enlace:

<http://bit.ly/SDest>

También es posible acceder<sup>1</sup> utilizando el código QR que se encuentra en la Figura VII.4. Para ver los detalles de la hoja de cálculo de forma interactiva, con explicaciones del método puede acceder al siguiente enlace: <http://bit.ly/SDestDetalles>.

<sup>1</sup>Puede descargar en el siguiente enlace <http://bit.ly/SDestZip> una versión adaptada para Excel.

#### 4. Tablas de comparación de resultados

Se resolvió el Problema 9.15 del libro Treybal (1988) para evaluar el simulador realizado. A continuación se muestran lado a lado los resultados obtenidos en la resolución del problema tanto en la hoja de cálculo como en la resolución manual. Se muestra el porcentaje de error de la resolución manual respecto a la resolución en la hoja de cálculo en la última columna. Ambas resoluciones se demuestran paso a paso en el Anexo 1 a partir de la página 138.

Cuadro VII.4: Comparación de resultados entre el simulador y la resolución manual

Descripción	Hoja de cálculo	Resolución manual	% Error
Flujo de destilado $D$ en kg/h	2095.23	2095.24	
Flujo de residuo $W$ en kg/h	1904.76	1904.76	
Flujo de alimentación $F$ en mol/h	39271.34	39271.34	
Flujo de destilado $D$ en mol/h	26825.10	26825.10	
Flujo de residuo $W$ en mol/h	12446.23	12446.23	
$z_F$	0.6689	0.6689	
$x_D$	0.9746	0.9746	
$x_W$	0.0101	0.0101	
$T_{sat_F}$ (K)	325.3310	325.3468	0.005 %
$T_{sat_D}$ (K)	319.8501	319.8955	0.014 %
$T_{sat_W}$ (K)	349.2388	349.2487	0.003 %
$H_L$ (J/mol)	525.94	522.59	0.638 %
$H_G$ (J/mol)	28735.72	28731.75	0.014 %
$H_F$ (J/mol)	8988.88	8985.33	0.039 %
Valor $q$	0.699998	0.700000	0.000 %
$R_m$	0.949220	0.946400	0.297 %
$N_m$	9	9	
$R$	1.898	1.893	0.274 %
$N_p$ teóricos	13	13	
$N_p$ reales ( $E = 0.487$ )	28	28	
$H_{G_1}$ (J/mol)	27102.91	27101.31	0.006 %
$H_W$ (J/mol)	3900.33	3891.00	0.239 %
$Q_c$ (J/h)	2106957267.0	2103058021.0	0.185 %
$Q_b$ (J/h)	1802496488.0	1798620175.6	0.215 %

## C. Experimentación realizada en el Laboratorio de Operaciones Unitarias

Se experimentó con varios sistemas alcohol-agua a reflujo total en la columna de destilación del Laboratorio de Operaciones Unitarias. Se realizaron dos destilaciones metanol-agua nombradas MetOH 1 y MetOH 2 respectivamente, y tres destilaciones etanol-agua nombradas EtOH 1, EtOH 2 y EtOH 3. A continuación se presentan las composiciones obtenidas en cada destilación. Dichas composiciones se ingresaron al simulador realizado y con ayuda de éste se obtuvo el número de platos mínimos requeridos y la eficiencia manejada.

Cuadro VII.5: Resultados de las destilaciones realizadas aplicadas al simulador

	MetOH 1	MetOH 2	EtOH 1	EtOH 2	EtOH 3
$x_D$	81.73 %	64.13 %	27.16 %	28.50 %	41.75 %
$x_F$	6.36 %	6.63 %	4.18 %	2.25 %	2.18 %
$x_W$	4.32 %	4.48 %	7.88 %	1.19 %	0.51 %
$N_p$ reales	11	11	11	11	11
$N_p$ según simulador	3	3	1	2	3
$E_o$	27.27 %	27.27 %	9.09 %	18.18 %	27.27 %
$E_{ML}$ según simulador	32.60 %	27.50 %	13.30 %	30.00 %	38.50 %

Figura VII.11: EtOH 1, simulación de la operación con reflujo total a 0.978 atm.

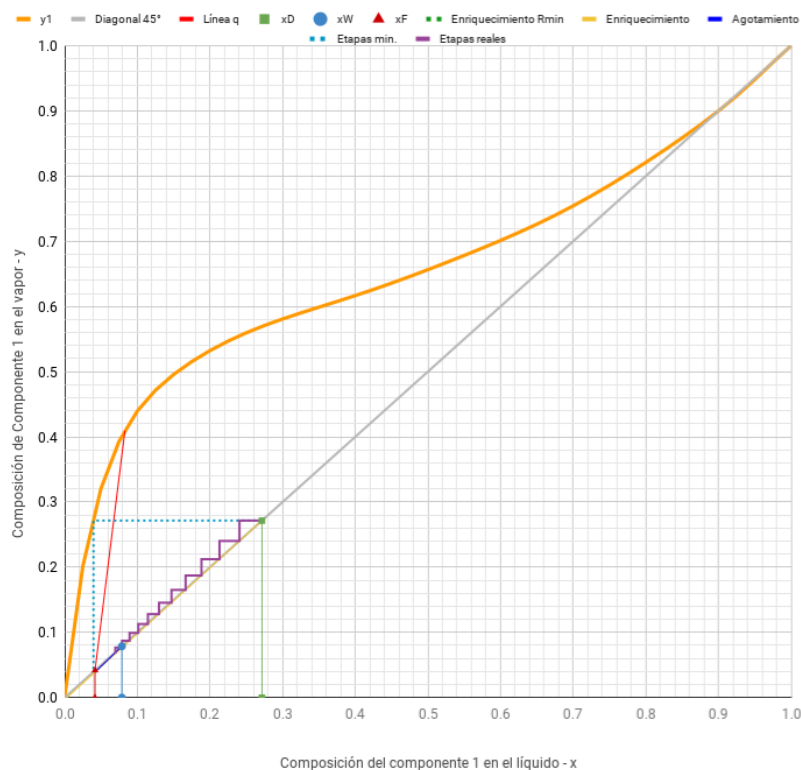
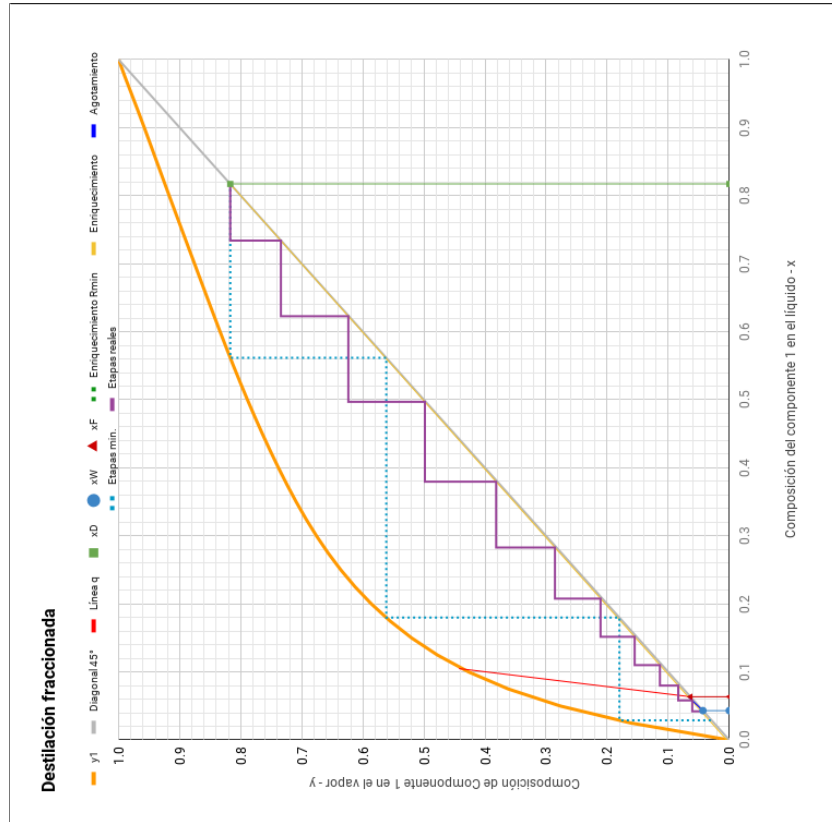


Figura VII.12: Simulación de la operación con reflujo total a 0.978 atm. Destilaciones metanol-agua.

(a) MetOH 1



(b) MetOH 2

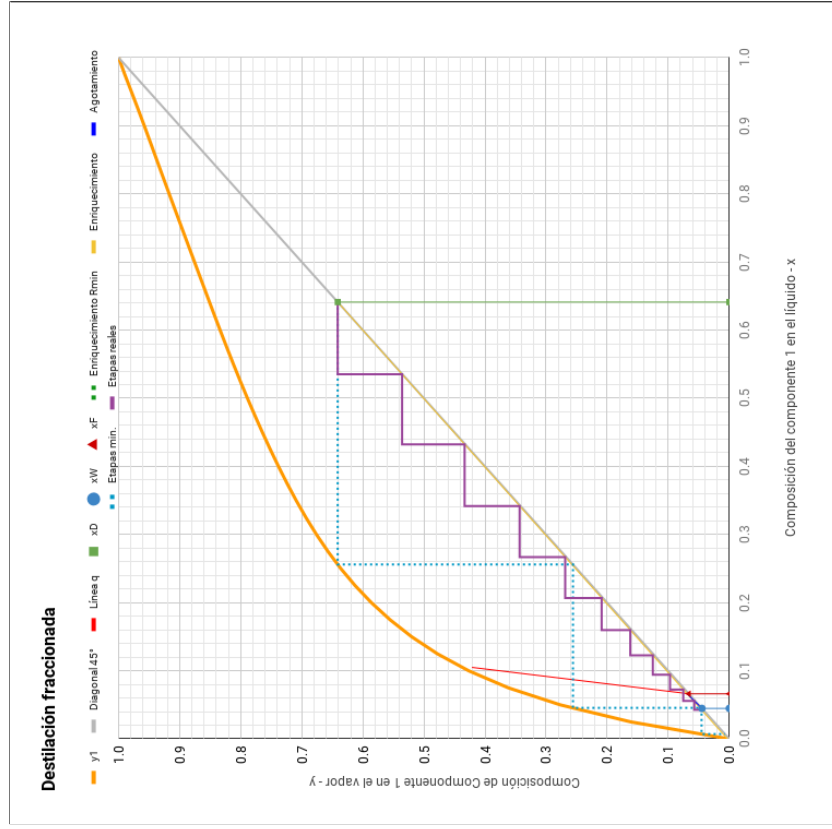
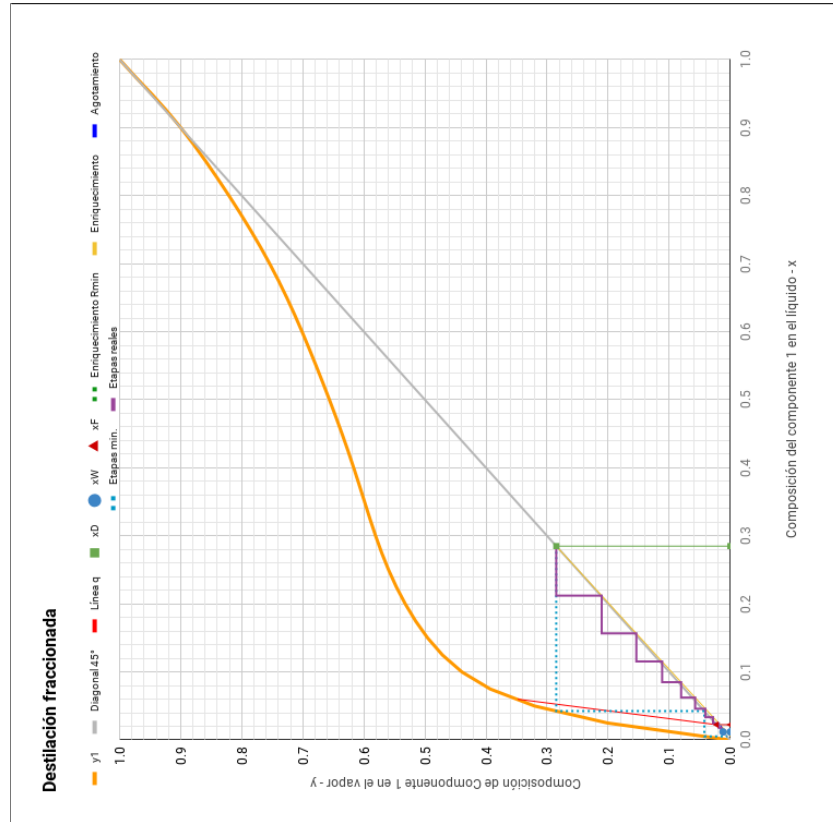
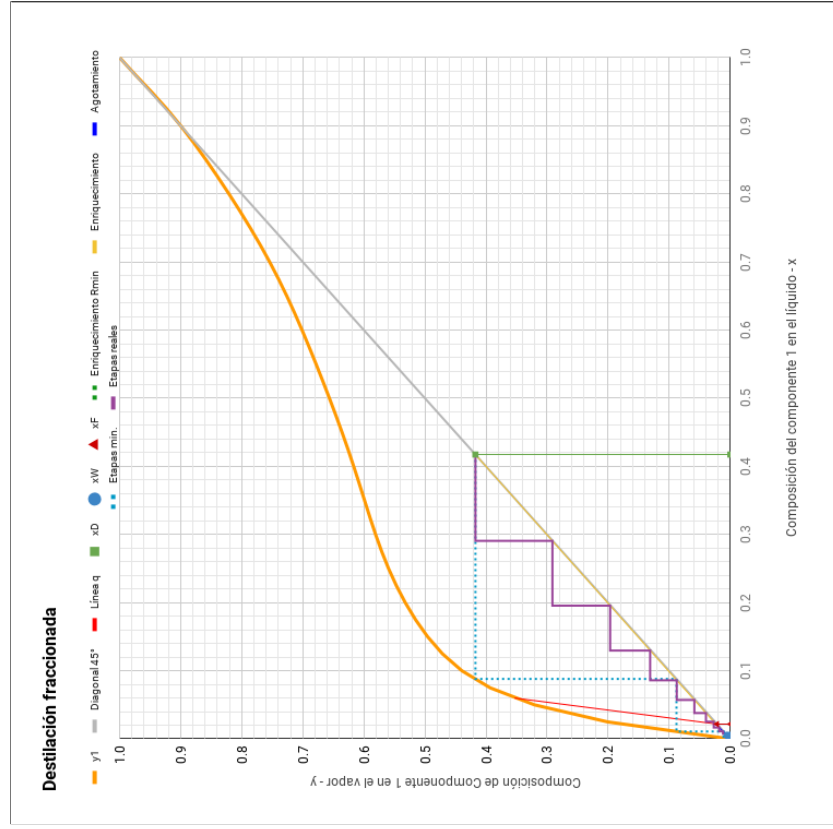


Figura VII.13: Simulación de la operación con refujo total a 0.978 atm. Destilaciones etanol-agua.

(a) EtOH 2



(b) EtOH 3



## VIII. DISCUSIÓN DE RESULTADOS

El objetivo general de este trabajo de graduación era elaborar una hoja de cálculo que permitiera resolver una operación de destilación en una columna de destilación fraccionada mediante el método de McCabe-Thiele. Se requería que dicha hoja de cálculo permitiera resolver varios sistemas binarios, fuera posible utilizarlo como herramienta para la enseñanza de la operación de Destilación y fuera utilizado también como herramienta en el Laboratorio de Operaciones Unitarias. Por tanto, con este objetivo en mente se trabajó una hoja de cálculo de acuerdo al objetivo, y se trabajó en línea<sup>1</sup> utilizando las hojas de cálculo de Google debido a la familiaridad que tiene la población estudiantil con dicha herramienta y aprovechando sus ventajas.

No es la primera vez que se realiza una hoja de cálculo con el método de McCabe-Thiele, en el curso de Transferencia de Masa usualmente se resuelven los balances de masa, materia y energía de una columna de destilación en una hoja de cálculo. Sin embargo, en estos casos se ha trabajado solamente con un sistema binario específico y toda la sección gráfica del método se realiza en la computadora utilizando un editor de dibujos o manualmente sobre una gráfica del equilibrio impresa. En el presente trabajo se buscó trasladar el método de McCabe-Thiele en su totalidad a una hoja de cálculo de manera que a través de funciones y gráficas se obtuvieran las etapas requeridas para la destilación, sobre un diagrama  $x-y$ . Como se explica en el Marco Teórico, las etapas de la destilación se obtienen dibujando un diagrama de escalera lo cual, manualmente es sencillo de realizar, sin embargo computacionalmente requiere conocer las ecuaciones de las rectas y curvas entre las cuales se graficarán las etapas. Por tanto al iniciar a desarrollar este simulador, se sabía que la principal dificultad se encontraría en la resolución gráfica y este fue el enfoque principal.

Lo primero que se debía de trabajar antes de iniciar con el método de McCabe-Thiele era tener a la disposición los datos de equilibrio de varios sistemas binarios. Para ello, se recurrió primero al *Perry's Chemical Engineers' Handbook* (Green y Perry, 2008) en la Sección 13 denominada *Distillation*. Se podía trabajar de dos maneras, una de ellas era trabajar con la volatilidad relativa ( $\alpha$ ) y obtener un equilibrio a partir de esta, y la segunda era trabajar directamente con los equilibrios de mezclas binarias específicas. En este caso se optó por la segunda opción. No se escogió la primera ya que se había investigado otros trabajos realizados anteriormente en relación a este tema (ver sección *Antecedentes*) y los tres trabajos disponibles, ya sea en línea o mediante descarga, trabajaban utilizando este método. Debido a esto se eligió la segunda opción como elemento diferenciador. Los otros dos trabajos que se presentan en los Antecedentes, no están disponibles para usarse, pero trabajaban solicitando que el usuario ingresara los datos de equilibrio. Por ello en este trabajo se decidió que ya se tendría una base de datos de los equilibrios para facilitarle al usuario la resolución.

Para obtener los datos de equilibrio, se trabajaron las mezclas líquido-vapor como mezclas no ideales. Se amplió toda la teoría de estas mezclas en la sección *Equilibrio líquido-vapor para mezclas no ideales* del Marco Teórico. Como se explica en dicha sección se requería incluir la no idealidad, utilizando el coeficiente de actividad ( $\gamma$ ) y aunque hay seis métodos para calcularlo<sup>2</sup> se utilizó el método de Van Laar. La elección de este método se debe principalmente a su sencillez algebraica, algo que es importante para no complicar la hoja de cálculo desarrollada. También se eligió este

---

<sup>1</sup>Por internet.

<sup>2</sup>Se mencionan en la misma sección del Marco Teórico.

método por ya que aunque solo es adecuado para sistemas binarios, en este caso no requerimos más que esta capacidad al no trabajar sistemas de más de dos compuestos. Por la confianza que brinda el *Manual del Ingeniero Químico* (Green y Perry, 2008) se utilizaron los datos que este provee. Fue en este manual, en el cual se encontraron los parámetros binarios de Van Laar, para diecinueve sistemas, requeridos para calcular el coeficiente de actividad. Estos valores<sup>3</sup> se utilizaron como base y por ello el simulador trabaja con estos 19 sistemas binarios presentados en el Cuadro IV.1.

El procedimiento seguido para obtener los datos de equilibrio se presenta en la sección *Hoja de cálculo para la determinación del Equilibrio* que se puede consultar en el Anexo 1. Para calcular los datos de equilibrio a una presión de trabajo dada se deben de obtener los datos  $x$ ,  $y$  y  $T^{sat}$ . Combinando la ley de Dalton de las presiones parciales y a ley de Raoult modificada para sistemas no ideales se tiene la ecuación:

$$P_t = x_1\gamma_1P_1^{sat} + x_2\gamma_2P_2^{sat} \quad (\text{VIII.1})$$

Para esta expresión, las presiones de saturación ( $P_1^{sat}$  y  $P_2^{sat}$ ) se obtienen utilizando la ecuación de Antoine la cual depende de  $T^{sat}$ . Los coeficientes de actividad se calculan utilizando las ecuaciones de Van Laar. Por tanto, incluyendo estas ecuaciones en (VIII.1) se obtiene la siguiente expresión:

$$P_t = x_1 \times e^{\left(A_{12} \left(\frac{A_{21}x_2}{A_{12}x_1 + A_{21}x_2}\right)^2\right)} \times 10^{\left(A_1 - \frac{B_1}{T^{sat} + C_1}\right)} + x_2 \times e^{\left(A_{21} \left(\frac{A_{12}x_1}{A_{12}x_1 + A_{21}x_2}\right)^2\right)} \times 10^{\left(A_2 - \frac{B_2}{T^{sat} + C_2}\right)} \quad (\text{VIII.2})$$

Por tanto, para obtener la temperatura de equilibrio a un valor de  $x_1$  dado debe realizarse lo que en termodinámica se denomina el *Cálculo de la temperatura del punto de burbuja*. En este cálculo se conoce la presión del sistema ( $P_t$ ). Sin embargo primero no se obtiene dicha presión, se fija la composición del líquido saturado ( $x_1$ ) y se utiliza una  $T^{sat}$  supuesta o provisional y se obtiene un valor de  $P_t$ . Se modifica la  $T^{sat}$  para obtener una  $P_t$  más cercana al valor requerido. De la misma manera itera repetitivamente hasta obtener la presión requerida. Por este requerimiento, y para no realizar la iteración de forma manual, se utilizó el complemento *Solver* que se puede instalar en las hojas de cálculo de Google. Se utiliza el método no lineal que incluye este complemento ya que, como se aprecia en la ecuación (VIII.2), al usar la ecuación de Raoult modificada en conjunto con la ecuación de Antoine se obtiene una ecuación en la cual la presión de la mezcla ( $P_t$ ) no está linealmente relacionada a la temperatura de saturación ( $T^{sat}$ ). Se amplía de forma detallada el uso de este complemento en el Anexo1. De esta experiencia se pudo apreciar de forma más evidente que las hojas de cálculo en línea tienen ya poca diferencia respecto a las hojas de cálculo convencionales, y pueden aplicarse ampliamente en los cursos de ingeniería, cosa que antes no era posible.

Utilizando esta hoja de cálculo ya realizada se puede calcular cualquiera de los 19 sistemas presentes a cualquier presión que el usuario requiera, sin embargo requiere el uso de *Solver* en cada una de las 21 filas, que contienen 21 concentraciones de líquido, para calcular el equilibrio completo. Esto, a pesar de ser sencillo en comparación a una resolución manual, requiere tiempo de realizar, por ello se decidió realizar las iteraciones por el usuario y los resultados almacenarlos en una base de datos. Por la cantidad de tiempo que se requería para realizar el equilibrio de los 19 sistemas, se obtuvieron los datos únicamente a dos presiones, en función de los usos principales que tendrá esta hoja de cálculo.

Como se menciona previamente, esta herramienta se utilizará en el curso de Transferencia de Masa y en el Laboratorio de Operaciones Unitarias. En el primero se requerirán resolver los problemas de libros como Treybal (1988) y Benítez (1967) por lo que se revisaron dichos libros y la mayoría de problemas indican que la presión de trabajo es de 1 atm. En el segundo, la operación se realiza a la presión del Laboratorio de Operaciones Unitarias de la Universidad del Valle de Guatemala la cual, por estar la ciudad a mayor altitud, es menor a 1 atmósfera. La presión, de acuerdo al barómetro del laboratorio se mantiene de forma estable en 991 mbar, es decir 0.978 atm. Por ello únicamente se guardaron en la base de datos los 19 sistemas a 1 atm y 19 sistemas a 0.978 atmósferas. Sin embargo,

<sup>3</sup>Datos obtenidos de los cuadros 13-2 y 13-4 de la 8va. edición del libro.

la hoja de cálculo para obtener equilibrios personalizados se dejó como parte del simulador en caso de que el usuario desee calcular alguno de los sistemas presentes a otra presión.

En caso de que el usuario desee utilizar otro sistema binario que el simulador realizado no incluya el usuario debe poder ingresar sus propios valores. Para satisfacer esta necesidad se dejó una pestaña en la hoja de cálculo preparada para tal fin. De esta manera el simulador realizado se amplió y se puede incluso afirmar que puede ser utilizado para resolver cualquier sistema binario que el usuario desee resolver. De esta manera se logró el primer objetivo específico de forma completa utilizándose la ley de Raoult modificada, la ecuación de Antoine y los parámetros de Van Laar para calcular el equilibrio de sistemas binarios no ideales.

El siguiente objetivo específico era realizar los balances de masa y energía del sistema aplicando el Método de McCabe-Thiele y realizar la resolución gráfica del mismo. Antes de iniciar fue importante realizar una revisión de los problemas comunes de destilación para tomar en cuenta todos los requerimientos del simulador. Se encontró que normalmente se daba como dato la cantidad de solución alimentada por ello se le solicita al usuario dicho dato. También es importante recordar que existen dos tipos de destilación, es decir destilación con rehervidor o destilación con vapor vivo. Dependiendo de qué tipo de destilación se está realizando el balance es diferente, se deben mostrar diferentes datos y el diagrama de flujo es diferente. Se utilizó el sistema de validación de datos de las hojas de cálculo de Google a través del cual se obtiene una lista desplegable con las dos opciones: **Rehervidor** o **Vapor vivo**. El mismo sistema de validación de datos se configuró para impedir que el usuario ingrese valores menores a 0 % y mayores a 100 % en las concentraciones de las corrientes. Se creó otra lista desplegable permitía escoger el estado térmico de la alimentación. Usar estas listas desplegables le ha dado al simulador realizado un aspecto más formal, al permitir la interacción del usuario.

Para presentar el diagrama de flujo adecuado en función de lo que elija el usuario se aprovechó una función propia de Google, la cual no se presenta en Excel. La función `=IMAGE` ha sido un hallazgo muy importante para el correcto funcionamiento del simulador ya que permite insertar, en una celda, una imagen desde una dirección de internet especificada. En el Anexo 2 se amplía sobre el uso de esta función y su sintaxis. Tener disponible esta opción fue una ventaja ya que al usarse en conjunto con la función lógica `=SI` permitió elegir una imagen, en caso de trabajar con vapor vivo y otra diferente en caso de utilizar rehervidor con lo cual el estudiante puede siempre guiarse con el diagrama de flujo adecuado al sistema elegido.

Otro aspecto que se debía tomar en cuenta era que la alimentación puede realizarse de varias formas, como líquido subenfriado, líquido saturado, mezcla de líquido y vapor, vapor saturado y vapor sobrecalentado. Dependiendo del tipo de alimentación, cambia de forma marcada el diagrama McCabe-Thiele a obtener. Esta condición térmica de la alimentación se expresa numéricamente en el valor  $q$  a partir del cual se obtiene la curva  $q$ . Como se explica en el marco teórico la curva  $q$  nos indica el plato en el cual se debe alimentar así como el punto en el que se separa la sección de enriquecimiento de la sección de agotamiento. Los trabajos previos encontrados<sup>4</sup> no amplían mucho en este sentido y solamente le solicitan al usuario ingresar el valor  $q$ , por lo que el usuario debe calcular primero las entalpías  $H_f$ ,  $H_L$  y  $H_G$  para poder resolver el sistema. En este caso, sin embargo, se buscó que el usuario no tuviera que realizar dichos cálculos previos, sino que estos se programaron en la hoja de cálculo con el objetivo que el simulador fuera lo más completo posible. Por ello solamente se le da la opción de elegir al usuario el tipo de alimentación, debe ingresar también otra información requerida para el cálculo de entalpías, como  $T$  en caso de fluidos por encima o debajo del equilibrio, o porcentaje de vapor en el caso de las mezclas vapor-líquido.

El simulador se programó para que se obtuvieran todos los datos requeridos para el método incluyendo todos los valores para los balances de masa, materia y energía. Las temperaturas de

---

<sup>4</sup>Ver sección de *Antecedentes*.

saturación, por ejemplo son importantes para calcular los calores latentes de las corrientes y estos últimos para calcular las entalpías de las corrientes como vapor saturado. Al trabajar convencionalmente este método en una hoja de cálculo se realiza usualmente una interpolación lineal ubicando visualmente los valores entre los que se encuentra la concentración del flujo y se interpola utilizando la función =PRONOSTICO. Para no realizar este procedimiento se obtuvo una línea de tendencia polinomial de los datos  $x$  vs.  $T$ . Se utilizó un polinomio de grado 10 ya que los polinomios de menor grado no permiten una convergencia adecuada de los datos. Con un polinomio de grado 10 se asegura que se obtendrá siempre un  $r^2$  mayor a 0.99 independientemente del sistema binario que se utilice. De esta manera se logró que los datos obtenidos a partir de dicha línea de tendencia fueran lo más cercanos a la temperatura de saturación real. Se realizó lo mismo con los datos  $x$  vs.  $y$  porque se requiere que en función de una concentración del líquido ( $x$ ) pueda obtenerse la concentración del vapor en equilibrio ( $y^*$ ).

Ahora, para determinar el número de etapas en forma automática, según método McCabe-Thiele, se requería obtener la concentración del líquido en equilibrio ( $x^*$ ) correspondiente a cualquier  $y$  dada. En este caso una línea de tendencia  $y$  vs  $x$  habría resultado la opción más sencilla, sin embargo, tal y como se explica detalladamente en el Anexo 1, esto no fue posible para un simulador con la posibilidad de trabajar con 19 sistemas diferentes. Esto se debe a que debido a la no idealidad de las soluciones, el equilibrio tiene desviaciones importantes respecto a la Ley de Raoult y pueden existir azeótropos. En estos casos puede darse que para varios valores de  $x$  se obtenga el mismo valor de  $y$ . Esto quiere decir que si se desea obtener un valor de  $x^*$  a partir de un  $y$  dado se tendrán dos o más opciones entre las cuales elegir. Esto imposibilita determinar una función que describa las relaciones  $y - x$  para algunos de los 19 sistemas binarios, y como el simulador es general, debe trabajar con todos los sistemas binarios no solamente con algunos. Por ello se optó por realizar interpolación lineal entre parejas adyacentes de concentraciones ( $x, y$ ) a partir de los datos de equilibrio.

La interpolación lineal se realiza ya que, aunque la relación  $y, x$  sea una curva, las parejas de datos utilizadas se encuentran tan cercanas entre sí que el segmento entre ambos puede considerarse lineal. Nuevamente, en una resolución normal, para interpolar, se buscan visualmente los datos entre los cuales se encuentra el valor requerido e interpolamos. Sin embargo requerimos que esto sea realizado por la computadora y no por el usuario. Para que todo este procedimiento fuera automático se investigó cómo se podían utilizar las funciones disponibles para que la computadora realizara la búsqueda de los pares de datos entre los cuales se encuentra el valor a buscar. Esto se logró mediante el uso de arreglos en fórmulas, en conjunto con las funciones =COINCIDIR, =ÍNDICE y =PRONÓSTICO tal y como se explica en la sección *Líneas de tendencia* en el Anexo 1. Haciendo este uso de fórmulas se logró que el simulador diagrame de forma automática las etapas escalonadas según el método de McCabe-Thiele sin necesidad de recurrir y profundizar en la programación en Google Apps Scripts<sup>5</sup>.

Otro aspecto importante del simulador realizado es que este permite obtener en número de etapas requeridas en caso de no tenerse una eficiencia del 100%. De los trabajos previos que se muestran en la sección de *Antecedentes* solamente el software pagado *MCTH - Número de platos teóricos McCabe-Thiele* nos permite incluir la eficiencia, por lo que en este sentido el resultado del presente trabajo presenta muchas ventajas respecto a la mayoría de simuladores similares. El simulador realizado también nos muestra una gráfica con el escalonado tomando en cuenta la eficiencia ingresada por el usuario y nos muestra una gráfica del pseudoequilibrio alcanzado. Para que el simulador sea fácil de entender para las personas que deseen modificarlo se utilizaron *Rangos con nombre* de manera que se entienda qué variable se está llamando en vez de que aparezca el código de la celda. Utilizar nombres en vez de la nomenclatura normal de una hoja de cálculo puede ser muy útil no solamente en este simulador, sino en cualquier hoja de cálculo realizada en el curso de ingeniería para apoyar la comprensión de algunas operaciones. En el Anexo 1 de este trabajo se presenta de forma detallada la elaboración de esta hoja de cálculo, incluyendo las fórmulas utilizadas en cada paso,

<sup>5</sup>Google Apps Scripts es similar al uso de Visual Basic en Excel.

los complementos utilizados, los procedimientos realizados, y los nombres de los rangos utilizados. Se amplía también sobre la validación de datos utilizada para evitar que el usuario ingrese valores erróneos.

Como apoyo para el usuario de este simulador, especialmente pensando en los estudiantes de los cursos de Transferencia de Masa se realizó una comparación de la resolución de un problema de la destilación de una disolución compuesta por tetracloruro de carbono y disulfuro de carbono. Se realizó la resolución en el simulador y el procedimiento seguido se explica paso a paso y con capturas de pantalla<sup>6</sup>. También se realiza el procedimiento de forma manual, tal y como se realizaría con calculadora y dibujando sobre la gráfica del equilibrio. Luego se compararon los resultados obteniendo el porcentaje de error de la resolución manual con relación a la resolución teórica del simulador.

Los resultados de dicha comparación se muestran en la sección de *Resultados*. Como se pueda apreciar en el Cuadro VII.4 los resultados son evidentemente similares y ningún porcentaje de error es mayor al 1.0%. Se obtienen pequeños porcentajes de error en las temperaturas de saturación. En la temperatura de saturación ( $T_{satF}$ ) se obtuvo un 0.005% de error, al obtener  $T_{satD}$  un 0.014% y al obtener  $T_{satW}$  un 0.3%. Estos errores se deben a la forma en que se calculan dichas temperaturas. Al resolver de forma manual se realiza una interpolación lineal entre dos pares de datos para obtenerlas, mientras que en el simulador obtiene dichas temperaturas mediante un polinomio de grado 10 ( $r^2 > 0.99$ ) obtenido a partir de todos los pares de datos. En este problema que se realizó, en la pestaña *Líneas de tendencia* se consultó la información estadística del polinomio utilizado y se encontró que el coeficiente de determinación era de  $r^2 = 0.99998484$ . Por esta razón en el simulador se obtiene una temperatura de saturación más exacta que al obtenerlas de forma manual. Debido a que las entalpías de las soluciones dependen mucho de estas temperaturas, se obtienen entalpías un poco diferentes entre ambas resoluciones. Al obtener la entalpía del líquido de forma manual se obtuvo un porcentaje de error del 0.638% lo cual sigue siendo un error aceptable. Las ventajas del simulador son el ahorro de tiempo en la resolución y que se evitan los inconvenientes de una equivocación al resolverlo manualmente. Se cumplió de esta manera el segundo objetivo específico planteado al inicio de este trabajo.

El último objetivo consistía en realizar experimentación en el Laboratorio de Operaciones Unitarias para luego demostrar dichas operaciones en el simulador de acuerdo a las concentraciones de destilado,<sup>7</sup> y residuo resultantes de la experimentación. Se realizaron, por tanto, destilaciones metanol-agua y etanol-agua. Se operó a reflujo total y no de forma continua debido a que la válvula automática de la corriente de alimentación estaba dañada y desconectada del sistema de control, y la entrada de la alimentación estaba sellada. No se operó de forma *batch* o por lotes ya que el simulador está diseñado únicamente para resolver sistemas que trabajan en forma continua o a reflujo total.

Los datos obtenidos de las destilaciones realizadas se presenta en el Anexo 3, en la sección *Datos originales*. Posteriormente, en la sección *Datos Calculados* se presentan las concentraciones de las muestras de líquido obtenidas en cada plato. Se esperaba que la concentración de alcohol descendiera de forma uniforme conforme se descendía en la columna, obteniendo residuos con muy poca concentración de alcohol. Sin embargo, como se puede apreciar en la Figura XV.11 y en la Figura XV.12 sí se obtiene un descenso perceptible entre la concentración del reflujo (numerada como 0) y la concentración del residuo (numerada como 11) sin embargo, la concentración de alcohol en los platos intermedios fluctúan de forma perceptible.

A pesar de estas variaciones en los platos intermedios, las concentraciones del destilado que se recirculaba y del residuo que se mantenía en el calderín se mantuvieron constantes. Las muestras tomadas nos indicaron la concentración alcanzada en la operación a reflujo total. Estas concentraciones se promediaron para las tres mediciones presentes en cada destilación, estos datos se presentan en los Cuadros XV.46 y XV.47 para todas las destilaciones. También se tenía la concentración de

<sup>6</sup>Ver Anexo 1, sección *Comparación de un problema resuelto con el simulador y manualmente*.

<sup>7</sup> $x_D = x_{L_0}$ . En la experimentación se obtuvo  $x_{L_0}$  porque se operó a reflujo total.

la solución alimentada, en las primeras destilaciones<sup>8</sup>. Si se repetía una destilación con la misma solución, esta nueva destilación se hacía con la solución remanente de la destilación anterior por lo que se tomaban muestras de la solución del calderín antes de encender la columna y esta era la concentración de la solución inicial para la nueva destilación<sup>9</sup>. Se obtuvieron también los valores promedio de estos datos en el Cuadro XV.45.

A partir de las concentraciones  $x_f$ ,  $x_w$  y  $x_D = x_{L_0}$  se buscó simular la operación realizada a reflujo total e incluir la eficiencia a la cual se trabajó. No se conocía una eficiencia del líquido, ya que aunque se calcularon las eficiencias para cada plato, estas variaban mucho y no se pudo determinar una que aplicara en toda la torre. El objetivo fue por tanto determinar que eficiencia, según los cálculos teóricos, se tuvo sabiendo que se trabajaron con 11 etapas. Se explica en el Anexo 3, sección *Cálculos de muestra*, el detalle del procedimiento que se siguió para determinar la eficiencia en cada una de las corridas realizadas. En general, en el simulador se introdujeron valores reduciendo la eficiencia hasta lograr las 11 etapas requeridas que significarían los 10 platos y el calderín de la columna utilizada. El Cuadro VII.5 en la sección de *Resultados* presenta un resumen de las eficiencias obtenidas. Como se puede apreciar en dicho cuadro, en la primera destilación con metanol se obtuvo que la concentración en el destilado era de ( $x_D$ ) 81.73 % y de residuo era un 4.32 % en la columna de 11 etapas. Esta destilación, sin embargo, de ser totalmente eficiente podría lograrse con únicamente 3 etapas. La eficiencia, por tanto fue de 32.60 % asumiendo que la eficiencia es la misma en todas las etapas. La segunda destilación con metanol se realizó con una eficiencia del 27.50 %. En las destilaciones con etanol se obtuvieron eficiencias del 13.30 %, 30.00 % y 38.50 % respectivamente.

Estas eficiencias resultaron muy bajas y es probable que se deba a algunos problemas que se tuvieron durante las destilaciones. Se tomaron muestras del líquido para obtener la concentración de cada plato. A partir de estas muestras, si se toman en cuenta las suposiciones del método de McCabe-Thiele de que el vapor en equilibrio de un plato dado tiene la misma concentración que el plato superior inmediato, es entonces posible realizar un diagrama de McCabe-Thiele en el que se muestran las etapas de la operación, y es posible graficar el pseudoequilibrio. Sin embargo, en las operaciones realizadas, en algunos casos el plato inferior inmediato que debería tener menor concentración del alcohol trabajado tuvo en realidad mayor concentración. Una explicación de la variación de concentraciones es que, el método de McCabe-Thiele asume flujos molares de vapor y de líquido constantes, sin embargo en este caso es probable que no se haya alcanzado un estado completamente estacionario. Esto implicaría que el alcohol no se distribuyó a lo largo de la columna tal y como lo indicaría el equilibrio. Otra posible explicación para las concentraciones obtenidas es que la tubería de alimentación une todas las etapas y a pesar de que las válvulas manuales y automáticas se encontraban en posición de estar cerradas, es probable que algunas válvulas automáticas no cerraran bien con lo cual era posible que líquido de una etapa superior descendiera a etapas inferiores incrementando la concentración.

No fue posible determinar si realmente los flujos de líquido eran constantes en todos los platos y para corroborar que todos los derramaderos tuvieran el paso accesible para el líquido y las campanas estuvieran libres para el paso del gas. Se realizó un modelo 3D de los platos de los cuales consta la columna de destilación utilizada. Los planos de este modelo pueden consultarse en el Anexo 4 para tener una idea de la forma en que circulan los flujos de gas y líquido en el interior. Este modelo se realizó tomando como base un plato del mismo tipo que se encuentra para exposición y aprendizaje en el laboratorio ya que no es posible ver el interior de la columna. Por lo mismo solamente se puede suponer que las concentraciones varían de esta manera por no tener flujos iguales de vapor y de líquido a lo largo de toda la columna. Así como no se tuvo acceso a observar el interior de la columna, tampoco se pudo verificar las válvulas automáticas por lo que no se pudo corroborar si estas cerraban bien. Sin embargo, algo que sí se observó durante la destilación fue que las tuberías de

<sup>8</sup>La destilación que se denominó EtOH1 es la primera destilación etanol-agua y la que se nombró MetOH1 es la primera destilación metanol-agua

<sup>9</sup>Puede revisar el Anexo 3 en la sección *Procedimientos realizados para la experimentación en el Laboratorio de Operaciones Unitarias* para más información.

alimentación se llenaban de líquido aún estando cerradas las válvulas manuales (V-R01 a V-R10) y las válvulas automáticas (VS-R01 a VS-R10) colocadas también en posición de cerrado. En la parte superior las válvulas VS-003 y V-013 también se encontraban cerradas y las válvulas desde el tanque de alimentación se encontraban selladas por lo que se esperaba que la tubería de alimentación se mantuviera vacía al estar aislada, sin embargo, se llenaron de solución proveniente de los platos. En el diagrama de tuberías e instrumentación (P&ID) se muestra cómo estaban configuradas dichas válvulas. Si estas permitían el paso de líquido de etapas superiores a etapas inferiores tal y como se plantea, es seguro que esto disminuyera la eficiencia porque al estar varios platos conectados ya no operan adecuadamente como etapas independientes.

Se tuvo también otro problema con los índices de refracción de algunas muestras. Como se puede apreciar en los Cuadros XV.32 y XV.33, en algunos platos no fue posible determinar una concentración, esto se debió a que algunos de los índices de refracción obtenidos de las muestras de los líquidos están por encima del rango de una solución metanol-agua. Como se puede apreciar en la Figura XV.8 las soluciones etanol-agua tienen índices de refracción mayores que los de las soluciones metanol-agua lo cual da un indicio de contaminación de etanol en la columna. Esto es posible ya que esta columna se utiliza principalmente para destilaciones etanol-agua a partir de soluciones fermentadas. A pesar de que se vació la columna y se dejaron abiertas las válvulas de gas para que se evaporaran los remanentes de alcohol, no fue posible realizar una limpieza exhaustiva y es posible que se tuvieran remanentes de etanol en la columna.

Las destilaciones realizadas se muestran en el Anexo 3 (Figuras XV.13-XV.17). Para dichos diagramas, aquellas concentraciones que en vez de disminuir aumentaban fueron sustituidas por la concentración en la etapa anterior. Esto se realizó con el objetivo de obtener diagramas más claros en los que se buscaba minimizar el efecto de los flujos no estacionarios que se tuvieron en la experimentación. Se presenta también en la sección de *Resultados* una captura de pantalla, del gráfico McCabe-Thiele obtenido en el simulador, utilizando las concentraciones de  $x_D$ ,  $x_F$  y  $x_W$  cada una de las destilaciones realizadas. En estos gráficos se pueden apreciar en celeste las etapas necesarias para las concentraciones obtenidas, si se hubiera trabajado con el 100% de eficiencia, y en morado las 11 etapas con las que cuenta la columna utilizada, trabajando una eficiencia ( $E_{ML}$ ) uniforme para todas las etapas. Esta eficiencia se presenta en el Cuadro VII.5. De esta manera se concluyó con el tercer objetivo específico del presente trabajo logrando así alcanzar todos los objetivos propuestos.

## IX. CONCLUSIONES

- En una hoja de cálculo se programaron las ecuaciones necesarias, en conjunto con el complemento *Solver* para calcular el equilibrio de 19 sistemas a diferentes presiones según lo ingrese el usuario.
- Se trasladó toda la resolución del método de McCabe-Thiele a una hoja de cálculo en línea de manera que se obtienen los balances de masa, los balances de energía y los gráficos del método logrando el cálculo digital de destilaciones en una columna de destilación fraccionada.
- La hoja de cálculo desarrollada puede encontrarse a través de internet en el enlace <http://bit.ly/SDest>. Se han bloqueado algunas celdas de dicha hoja de cálculo para evitar modificaciones a los cálculos, sin embargo puede realizarse una copia del documento para modificarlo libremente.
- Los resultados que brinda la hoja de cálculo están basados en datos obtenidos del *Manual del Ingeniero Químico* (Green y Perry, 2008) así como en interpolaciones lineales y polinomiales por lo que estos son más exactos en comparación a una resolución manual
- Se realizó la experimentación planteada, en el Laboratorio de Operaciones Unitarias, ingresando en el simulador las concentraciones obtenidas y se obtuvieron valores de eficiencia  $E_{ML}$  para cada una de las destilaciones realizadas con lo cual se ejemplificó el uso del simulador en el curso de Operaciones Unitarias.

## X. RECOMENDACIONES

- Utilizar el resultado del presente trabajo en el curso de *Transferencia de Masa* utilizando las ventajas que ofrecen las hojas de cálculo de Google, con el profesor explicando su uso y la teoría correspondiente y los estudiantes siguiendo la explicación desde sus computadoras.
- Se recomienda que cada estudiante imprima o realice una fotocopia del manual dado en el Anexo 1 y ayudarse de este al utilizar el simulador.
- Los estudiantes del curso de *Transferencia de Masa* pueden utilizar la teoría de este trabajo, y la resolución manual realizada en el Anexo 1 para comprender mejor la operación de destilación.
- Los estudiantes que se encuentren cursando el *Laboratorio de Operaciones Unitarias* pueden apoyarse con los planos, y los modelos 3D realizados de la Columna de destilación así como del diagrama P&ID que se encuentra en el Anexo 4 para comprender el equipo con el que cuenta y para planificar la práctica de destilación.
- Se recomienda continuar con el uso de las hojas de cálculo de Google para aplicaciones en la enseñanza y práctica de ingeniería debido a su versatilidad y a su potencial en el aula.
- Para posteriores trabajos se puede realizar otro grupo de Hojas de cálculo, similar a las elaboradas en el presente trabajo pero para el Método de Ponchón y Savarit.
- Se anima también a realizar otra hoja de cálculo que resuelva un método gráfico para las destilaciones fraccionadas tipo batch tal y como se presenta en el Capítulo 9 del libro *Separation Process Engineering* de Wankat.
- Instalar y automatizar un sistema de alimentación, con un tanque de alimentación de mayor tamaño que el actual y que se encuentre a nivel del suelo para facilitar el llenado. Reparar la válvula de alimentación que actualmente no se encuentra en funcionamiento. Revisar también las tuberías de alimentación y verificar el cierre de las válvulas.
- Reconfigurar nuevamente el sistema de tuberías de las tomas de muestra de líquidos para poder instalar adecuadamente el refractrómetro en línea ya disponible en el Laboratorio de Operaciones Unitarias.
- En próximos trabajos, cuando ya se haya automatizado la sección de alimentación, se recomienda realizar destilaciones en operación continua, con distintos flujos de alimentación, y distintas razones de reflujo.
- Realizar destilaciones con otros sistemas, por ejemplo: isopropanol-agua, así como más destilaciones con los dos sistemas trabajados en el presente documento.

## XI. BIBLIOGRAFÍA

- Adielsson, Mangus y col. *Lista de funciones de Hojas de cálculo de Google*. URL: <https://support.google.com/docs/table/25273?hl=es>.
- AICHe.org (2017). *McCabe-Thiele Equilibrium Stages Demonstration*. AICHE. URL: <https://www.aiche.org/academy/videos/mccabe-thiele-equilibrium-stages-demonstration>.
- Anónimo. *VLE-Calc: Calculator of vapor-liquid and liquid-liquid phase equilibria*. URL: [http://vle-calc.com/phase\\_diagram.html](http://vle-calc.com/phase_diagram.html).
- Benítez, Jaime (1967). *Mass Transfer Operations*. 2.<sup>a</sup> ed. John Wiley & Sons, Inc.
- Chemical Engineering Images. *Distillation Column*. URL: <http://chemical-engg.com/gallery/image/43-distillation-columnpng/?browse=1>.
- Clough, David E. (Ago. 2016). “Use Spreadsheets for ChE Problem-Solving”. En: *CEP Magazine*, págs. 25-34.
- Collins, Ben (2015). *10 techniques for building dashboards in Google Sheets*. URL: <http://www.benlcollins.com/spreadsheets/10-techniques-for-building-dashboards-in-google-sheets/>.
- Department of Chemical, Faculty of the y Biological Engineering (2011). *Distillation - Murphree Efficiency*. University of Colorado Boulder. URL: <https://www.youtube.com/watch?v=rk8jpKHpD2o>.
- Frostware FX (2016). *3D model Distillation Trays*. URL: <https://www.turbosquid.com/3d-models/3d-model-distillation-trays/1100061>.
- Green, Don W. y R. Perry (2008). *Perry's Chemical Engineers' Handbook Eighth Edition*. 8.<sup>a</sup> ed. McGraw-Hill, Inc.
- J. Walk & Associates, Inc. *Chart Trendline Formulas*. URL: [http://spreadsheetpage.com/index.php/tip/chart\\_trendline\\_formulas](http://spreadsheetpage.com/index.php/tip/chart_trendline_formulas).
- Jevric, Jake y Muhammad Fayed (Dic. 2002). “Shortcut Distillation Calculations via Spreadsheets”. En: *CEP Magazine*, págs. 60-67.
- Mathias, Paul M. (Dic. 2009). “Visualizing the McCabe-Thiele Diagram”. En: *CEP Magazine*, págs. 36-444.
- Mattews, M. A. y J.A. Ritter (2001). *Ethanol Water Vapor-Liquid equilibrium using an Othmer Still*. University of South Carolina.
- Real Academia de Ingeniería (2017). *Diccionario Español de Ingeniería*. URL: <http://diccionario.raing.es/>.
- Romero, Ismael (2014). *Obtener línea de tendencia polinómica matricialmente*. URL: <http://excelforo.blogspot.com/2014/05/obtener-linea-de-tendencia-polinomica.html>.
- Smith, J., H. Van Ness y M. Abbott (2005). *Chemical Engineering Thermodynamics*. McGraw-Hill, Inc.
- Treybal, Robert E. (1988). *Operaciones de Transferencia de Masa*. Juárez, Estado de México: McGraw-Hill/ Interamericana de México, S.A. de C.V.
- Van Winkle, M. (1967). *Distillation*. McGraw-Hill, Inc.
- Young, Charlie. *Nonlinear Curve Fitting in Excel*. URL: <http://www.engineerexcel.com/nonlinear-curve-fitting-in-excel/>.
- Zill, Dennis y Jacqueline Dewar (2008). *Precálculo con avances de cálculo*. 4.<sup>a</sup> ed. McGraw-Hill, Inc.

## XII. NOMENCLATURA Y GLOSARIO

### A. Nomenclatura

$C_{pL}$	Capacidad calorífica específica del líquido, $J/(mol\ K)$
$D$	Flujo del destilado, $mol/h$ o $kg/h$
$E_{MV}$	Eficiencia de Murphree del vapor, <i>fracción</i>
$E_{ML}$	Eficiencia de Murphree del líquido, <i>fracción</i>
$E_o$	Eficiencia global, <i>fracción</i>
$F$	Flujo de alimentación, $mol/h$ o $kg/h$
$G$	Flujo de vapor entrante (vapor vivo), $mol/h$ o $kg/h$
$H$	Entalpía molar, $J/mol$
$L_0$	Reflujo externo, $mol/h$ o $kg/h$
$M$	Peso molecular, $g/mol$
$nD$	Índice de refracción
$N_m$	Número mínimo de platos
$N_p$	Número de platos teóricos
$P$	Presión, atm, Torr o psi
$P_i^{sat}$	Presión de vapor del componente $i$ , Torr
$P_t$	Presión total de un sistema, Torr
$\bar{p}$	Presión parcial, Torr
$q$	Cantidad dada por la entalpía de alimentación a la entrada
$Q_b$	Calor agregado al rehervidor, $J/h$ o $kJ/h$
$Q_c$	Calor eliminado en el condensador, $J/h$ o $kJ/h$
$R$	Relación de reflujo externo, $mol\ reflujo/mol\ destilado$
$R_m$	Relación de reflujo externo mínimo, $mol\ reflujo/mol\ destilado$
$T$	Temperatura, K o °C
$T_{ref}$	Temperatura de referencia, K
$W$	Flujo de la solución residual, $mol/h$ o $kg/h$
$x$	Concentración del compuesto 1 en el líquido, $mol\ comp./mol\ solución$
$x^*$	$x$ en el equilibrio con $y$ , $mol\ compuesto/mol\ solución$
$y$	Concentración del compuesto 1 en el gas, $mol\ compuesto/mol\ solución$
$y^*$	$y$ en el equilibrio con $x$ , $mol\ compuesto/mol\ solución$
$z$	Concentración promedio en una solución o mezcla de varias fases, $mol\ compuesto/mol\ solución$
$\alpha$	Volatilidad relativa, <i>adimensional</i>
$\gamma$	Coefficiente de actividad, <i>adimensional</i>
$\lambda$	Calor latente molar de evaporación, $J/mol$
$\mu$	Viscosidad del líquido, cP
$\theta$	Tiempo de duración, $h$

## B. Glosario

A continuación se presentan algunas definiciones importantes para el presente trabajo, extraídas del Diccionario Español de Ingeniería (Real Academia de Ingeniería, 2017).

- **Destilación** Operación de separar, por medio de vaporización y condensación posterior, los diferentes componentes de una mezcla aprovechando sus diferentes puntos de ebullición.
- **Disolución** Mezcla homogénea a nivel atómico, iónico o molecular, de dos o más sustancias, de forma que el resultado presenta una fase única, con las mismas propiedades en todos sus puntos.
- **Disolución ideal** Disolución que cumple con la ley de Raoult y en la que cada molécula de los componentes en la mezcla es afectada por las mismas fuerzas que si estuvieran en estado puro.
- **Equilibrio termodinámico** Propiedad de un sistema que está en equilibrio mecánico, químico y térmico.
- **Equilibrio químico** Estado en el que una reacción química tiene efecto a iguales velocidades, en direcciones opuestas, de modo que las concentraciones de las sustancias reactantes no cambian con el tiempo.
- **Fase** Presentación de un sistema físico (sólido, líquido o gas), que es completamente homogéneo incluso en su composición química, que tiene límites definibles y que puede separarse físicamente de otras fases.
- **Gas ideal** Gas cuyas moléculas son infinitamente pequeñas y no ejercen fuerza alguna entre sí. Gas que obedece a la ley de Boyle (el producto de la presión y el volumen es constante a una temperatura constante) y a la ley de Joule (la energía interna es una función sólo de la temperatura).
- **Método de McCabe-Thiele** Procedimiento gráfico de cálculo del número de platos teóricos, o etapas de contacto, necesarios para una operación de destilación binaria dada.
- **Mezcla binaria** Mezcla de dos sustancias diferentes.
- **Operación unitaria** En ingeniería química, operación física básica de una planta de proceso químico, tal como la destilación, transmisión de calor y transferencia de materia, extracción, etc.
- **Presión parcial** En una mezcla y referido a un gas ideal, presión que ejercería dicho gas si ocupara él sólo el mismo volumen, a la misma temperatura.
- **Saturación** Punto de una disolución en que ya no es posible disolver más soluto.
- **Solución** Disolución.
- **Vapor saturado** Gas que está justo en, o por debajo de su punto de rocío debido a su contenido en agua.
- **Volatilidad** Cualidad de poseer un bajo punto de ebullición o una baja temperatura de sublimación, a presión ordinaria o, equivalentemente, de tener una alta presión de vapor a las temperaturas ordinarias.

## XIII. ANEXO 1: DESARROLLO DE LA HOJA DE CÁLCULO

### A. Procedimiento detallado para la elaboración del simulador

Se buscó que el simulador fuera lo más completo posible. Para ello se requería obtener el equilibrio de varios sistemas alcohol-agua y almacenar dichos datos para utilizarse en el método. Por ello la hoja de cálculo del simulador consiste en siete pestañas las cuales son:

1. Datos para equilibrio
2. Equilibrio
3. Base de datos
4. Datos del usuario
5. Líneas de tendencia
6. Resolución McCabe-Thiele
7. Columna

La primera pestaña *Datos para equilibrio* contiene los datos necesarios para la pestaña *Equilibrio* en la cual el usuario puede calcular los datos de equilibrio para cualquiera de los sistemas presentes en el simulador, a cualquier presión. La pestaña *Base de datos* contiene ya datos VLE a 1 atm y a 0.978 atm. En la pestaña *Datos del usuario* se pueden ingresar datos propios en caso de usarse un sistema que no se encuentra en la base de datos.

Las pestañas *Líneas de tendencia* y *Resolución McCabe-Thiele* se realizaron paralelamente y están muy relacionadas ya que la pestaña *Líneas de tendencia* contiene los datos obtenidos, sin formato pero que son importantes ya que se graficarán en *Resolución McCabe-Thiele*. La última pestaña *Columna* contiene un diagrama en el que se muestran las concentraciones de las corrientes en cada plato.

## 1. Hoja de cálculo para la determinación del equilibrio

Para poder calcular el equilibrio de acuerdo a los principios presentados en la Sección 2 del Marco Teórico se requiere que los datos del Cuadro IV.1 estén en la hoja de cálculo para ser importados dependiendo del sistema a utilizar. Por ello se agrega al inicio una hoja con dicho cuadro, se añade también el Cuadro IV.2 ya que dichos datos se utilizan también en el cálculo de entalpías al aplicar el método de McCabe-Thiele. En las Figuras XIII.2 y IV.2 se muestran ambos cuadros en la hoja de cálculo. Para facilitar la elaboración de las fórmulas posteriores así como para facilitar la comprensión de la hoja de cálculo se le añadió un nombre al rango en donde se encuentran los datos. Al rango en donde se encuentran los datos del primer cuadro se le nombró `Datos.sistema` para ello se selecciona el rango luego **Clic Derecho>Definir intervalo con nombre** y se nombra el rango. En el artículo *Use Spreadsheets for ChE Problem-Solving* se amplía sobre las ventajas de utilizar nombres de celdas en vez de la dirección de la celda al escribir las fórmulas para elaborar cálculos (Clough, Ago. 2016).

En otra hoja del mismo documento denominada *Equilibrio* se ingresaron todos los cálculos necesarios para que se pudieran obtener los datos de equilibrio del sistema elegido a la presión deseada. Primero se añadió en una celda una lista desplegable en la que se pudiera elegir cualquiera de las parejas que se presentan en el Cuadro IV.1 tal y como se muestra en la Figura XIII.1. Esto se realiza mediante **Clic Derecho>Validación de Datos>Lista a partir de un intervalo** tal y como se amplía en Collins (2015).

Figura XIII.1: Lista desplegable de los sistemas disponibles

<b>1-Propanol (1), Agua (2)</b>
1-Propanol (1), Agua (2)
2-Propanol (1), Agua (2)
Acetato de etilo (1), Etanol (2)
<b>Acetato de metilo (1), Metanol (2)</b>
Acetona (1), Agua (2)
Acetona (1), Cloroformo (2)
Acetona (1), Metanol (2)
Agua (1), 1-butanol (2)
Agua (1), Ácido Acético (2)
Agua (1), Ácido Fórmico (2)
Cloroformo (1), Metanol (2)
Etanol (1), Agua (2)
Etanol (1), Benceno (2)
Metanol (1), Acetato de etilo (2)
Metanol (1), Agua (2)
Metanol (1), Benceno (2)
n-Hexano (1), Etanol (2)
Tetracloruro de carbono (1), Benceno (2)
Tetrahidrofurano (1), Agua (2)

Figura XIII.2: Cuadros de datos para varios sistemas, útiles para el cálculo del equilibrio

		Constantes de Van Laar			Compuesto 1 - Constantes de Antoine			Compuesto 2 - Constantes de Antoine				
		A <sub>12</sub>	A <sub>21</sub>	A	B	C	A	B	C			
1	<b>Sistema para equilibrio líquido-vapor</b>											
2												
3												
4	<b>Sistema</b>	<b>Compuesto 1</b>	<b>Compuesto 2</b>	<b>A</b>	<b>B</b>	<b>C</b>	<b>A</b>	<b>B</b>	<b>C</b>			
5	1-Propanol (1), Agua (2)	Agua	Agua	1.1572	8.37895	1788.020	227.438	8.07131	1730.630	233.426		
6	2-Propanol (1), Agua (2)	Agua	Agua	2.4702	8.87829	2010.320	252.636	8.07131	1730.630	233.426		
7	Acetato de etilo (1), Etanol (2)	Etanol	Etanol	0.8552	7.10179	1244.951	217.881	7.58670	1281.590	193.768		
8	Acetato de metilo (1), Metanol (2)	Metanol	Metanol	0.9614	7.06524	1157.630	219.726	8.08097	1582.271	239.726		
9	Acetona (1), Agua (2)	Agua	Agua	2.1041	7.11714	1210.595	229.664	8.07131	1730.630	233.426		
10	Acetona (1), Cloroforno (2)	Cloroforno	Cloroforno	-0.8643	-0.5899	7.11714	1210.595	229.664	8.08097	1582.271		
11	Acetona (1), Metanol (2)	Metanol	Metanol	0.6184	0.5797	7.11714	1210.595	229.664	8.08097	1582.271		
12	Agua (1), 1-butanol (2)	Agua	1-butanol	1.0996	4.1760	8.07131	1730.630	233.426	7.36366	1305.198		
13	Agua (1), Acido Acético (2)	Agua	Acido Acético	0.4973	1.0623	8.07131	1730.630	233.426	8.02100	1936.010		
14	Agua (1), Acido Fórmico (2)	Agua	Acido Fórmico	-0.2935	-0.2757	8.07131	1730.630	233.426	6.94459	1295.260		
15	Cloroforno (1), Metanol (2)	Metanol	Metanol	0.9356	1.8860	6.95465	1170.966	226.232	8.08097	1582.271		
16	Etanol (1), Agua (2)	Agua	Agua	1.6798	0.9227	7.58670	1281.590	193.768	8.07131	1730.630		
17	Etanol (1), Benceno (2)	Etanol	Benceno	1.8570	1.4785	7.58670	1281.590	193.768	6.87987	1196.760		
18	Metanol (1), Acetato de etilo (2)	Metanol	Acetato de etilo	1.0017	1.0524	8.08097	1582.271	239.726	7.10179	1244.951		
19	Metanol (1), Agua (2)	Metanol	Agua	0.8141	0.5619	8.08097	1582.271	239.726	8.07131	1730.630		
20	Metanol (1), Benceno (2)	Metanol	Benceno	2.1623	1.7925	8.08097	1582.271	239.726	6.87987	1196.760		
21	n-Hexano (1), Etanol (2)	Etanol	n-Hexano	1.9195	2.8463	6.91058	1189.640	226.28	7.58670	1281.590		
22	Tetracloruro de carbono (1), Benceno (2)	Tetracloruro de carbono	Benceno	0.0951	0.0911	6.84083	1177.910	220.576	6.87987	1196.760		
23	Tetracloruro (1), Agua (2)	Tetracloruro	Agua	3.0216	1.9436	6.99515	1202.290	226.254	8.07131	1730.630		
24												
25												
26												
27												
28												
29												
30												
31												
32	1-butanol	CH <sub>3</sub> (OH)	74.122	191.200	-730.4000	2.2988		71.274.000	0.04530	0.897	-0.512	563.100
33	2-Propanol	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> O	60.095	158.760	-635.0000	1.9690		68.985.000	0.64580	-0.538	0.332	536.800
34	1-Propanol	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> O	60.095	471.710	-4172.1000	14.7450	-0.01440	72.542.000	0.79137	-0.661	0.342	508.300
35	Acetato de etilo	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	88.105	226.230	-624.8000	1.4720		49.330.000	0.38470			523.300
36	Acetato de metilo	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	74.079	61.260	270.9000			44.920.000	0.36650			506.550
37	Acetona	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O	58.079	135.600	-177.0000	0.2837	0.00069	42.150.000	0.33970			508.200
38	Acido Acético	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	60.052	130.610	-320.8000	0.8083		40.170.000	2.60270		2.707	501.050

Compuesto	Fórmula	Masa molar	Capacidad calorífica [J/(kmol K)]	Calor latente [J/kmol]					Tc, K		
				C1	C2	C3	C4	C5	C6		
1-butanol	CH <sub>3</sub> (OH)	74.122	191.200	-730.4000	2.2988		71.274.000	0.04530	0.897	-0.512	563.100
2-Propanol	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> O	60.095	158.760	-635.0000	1.9690		68.985.000	0.64580	-0.538	0.332	536.800
1-Propanol	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> O	60.095	471.710	-4172.1000	14.7450	-0.01440	72.542.000	0.79137	-0.661	0.342	508.300
Acetato de etilo	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	88.105	226.230	-624.8000	1.4720		49.330.000	0.38470			523.300
Acetato de metilo	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	74.079	61.260	270.9000			44.920.000	0.36650			506.550
Acetona	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O	58.079	135.600	-177.0000	0.2837	0.00069	42.150.000	0.33970			508.200
Acido Acético	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	60.052	130.610	-320.8000	0.8083		40.170.000	2.60270		2.707	501.050

Fuente: Perry, Robert H., and Don W. Green. Perry's Chemical Engineers Handbook. New York: McGraw-Hill, 2008. Print.  
 Datos extraídos de los cuadros 13-2 y 13-4 de la 6va. edición del libro.

**Capacidades caloríficas y calores latentes de los compuestos**





Seguidamente se desea importar los datos con base en el sistema que elija el usuario en dicha lista desplegable. Los datos a importar son el nombre del primer compuesto, el nombre del segundo compuesto, las tres constantes de Antoine (A, B y C) para cada compuesto y los parámetros de Van Laar para interacción binaria del sistema. Para cada sistema binario, todos estos datos se encuentran en el mismo cuadro que el sistema, tal y como se muestra en la Figura XIII.2, por ello cada dato se importa mediante la función =BUSCARV así como se muestra en la siguiente fórmula en la que se importa el nombre del primer compuesto:

```
=BUSCARV(B6,Datos.sistemas,2,VERDADERO)
```

Tal y como se explica en el Anexo 2 el primer argumento se refiere al valor de búsqueda, en este caso la celda en la que se encuentra el sistema elegido, el segundo es el rango en donde se realiza la búsqueda. El tercer argumento es el índice, en este caso es 2 ya que el nombre del primer compuesto se encuentra en la segunda columna. En el cuarto argumento se coloca VERDADERO si la lista está ordenada alfabéticamente, como en el presente caso. Para importar la constante A de Antoine para el primer compuesto la fórmula es la misma (tal y como se muestra a continuación) a excepción del índice que ahora es 6 ya que es en la sexta columna que se encuentra este valor.

```
=BUSCARV(B6,Datos.sistemas,6,VERDADERO)
```

Mediante la misma fórmula se hace la importación de todos los datos requeridos. Como segundo paso el usuario debe ingresar la presión de trabajo, en atmósferas, a la que desea operar el sistema. Luego esta presión se convierte a Torr y a Psi para las operaciones posteriores. Estas conversiones se realizan mediante las siguientes fórmulas:

```
=CONVERTIR(B24,"atm","Torr")
=CONVERTIR(B24,"atm","psi")
```

La suma de la presión parcial de ambos componentes debe dar esta presión de trabajo que es la presión a la que funciona la torre. A continuación se presenta una captura de pantalla (Figura XIII.4) en la que se muestra la primera parte de la hoja en la que se calcula el equilibrio.

En esta sección se nombró cada una de las constantes de Antoine, por lo que se usa su nombre en vez de la dirección de la celda en las fórmulas posteriores. La constante en la celda C12 en la Figura XIII.4, por ejemplo, es la constante de Antoine A para el compuesto 1 y por tanto se nombró A.1. Las otras dos constantes se nombraron respectivamente B.1 y C.1. Se realizó lo mismo para las constantes del compuesto 2. Los parámetros de Van Laar se renombraron también por lo que la celda B17 en donde se encuentra  $A_{12}$  se nombró A.12 y la celda B18 se nombró A.21 ya que en esta celda se importa el valor del parámetro  $A_{21}$ . Se puede encontrar una lista completa de todos los rangos con nombre utilizados en los Cuadros XIII.2, XIII.3 y XIII.4.

Figura XIII.4: Primera captura de pantalla de la hoja en la que se realizará el cálculo de los valores de equilibrio para el sistema elegido

Buscar en el menú (Alt+F7) 100% - \$ % 0.00 123 - Anál

**Equilibrio líquido-vapor**

**Paso 1**

Seleccionar el sistema a utilizar:

**Sistema** 1-Propanol (1), Agua (2)

Nota: Las constantes se modifican automáticamente con el sistema

**Constantes de Antoine**

Componente	Código	A	B	C
1-Propanol	(1)	8.37895	1788.020	227.438
Agua	(2)	8.07131	1730.630	233.426

**Parámetros de Van Laar para interacción binaria**

A_12	2.9095
A_21	1.1572

**Paso 2** Presión de trabajo

Ingresar la presión de trabajo:

1	Atm
P_trab	760 Torr
	14.70 Psi

**Cálculo de equilibrio a la presión de trabajo**

**Paso 3**

x1	x2	y1	y2	Presión de saturación		Presión Parcial		P_tot (Torr)	P_tot/P_trab	y1	y2	Diagonal 45°
				P_1sat (Torr)	P_2sat (Torr)	y1P (Torr)	y2P (Torr)					
0.00	1.00	18.2476225	1.0000000	89.9969	828.4410145	760.0020994	0.0000000	760.0020994	1.0000	0	1	0.00
0.05	0.95	9.6716615	1.0159299	89.4485	545.1141843	514.3268207	263.6079926	496.3939754	1.0000	0.346853	0.653147	0.05
0.10	0.90	5.9155785	1.0567274	87.7862	509.0186673	482.5045469	301.1138878	458.8882001	1.0000	0.396203	0.603797	0.10
0.15	0.85	4.0387965	1.1154979	87.9928	504.9535117	478.9116497	305.9106679	454.0918175	1.0000	0.402514	0.597486	0.15

**Equilibrio líquido-vapor del sistema**

● y1  
— Diagonal 45°

Figura XIII.5: Segunda captura de pantalla de la hoja en la que se realizará el cálculo de los valores de equilibrio para el sistema elegido

Buscar en el menú (Alt+V)
10
123 - Atrial

14.70 | Psi

### Paso 3

#### Cálculo de equilibrio a la presión de trabajo

f <sub>e</sub>	A		B		C		D		E		F		G		H		I		J		K		L		M		N		O	
	x1	x2	y1	y2	T (°C)	P. Isat (Torr)	P. 2sat (Torr)	y1P (Torr)	P. Isat (Torr)	y2P (Torr)	P. Isat (Torr)	P. Isat (Torr)	P. Isat (Torr)	y1P (Torr)	y2P (Torr)	P. Isat (Torr)	P. Isat (Torr)	y1P (Torr)	y2P (Torr)	P. Isat (Torr)	P. Isat (Torr)	y1P (Torr)	y2P (Torr)	P. Isat (Torr)	P. Isat (Torr)	y1P (Torr)	y2P (Torr)	P. Isat (Torr)	P. Isat (Torr)	y1P (Torr)
26	0.00	1.00	18.3476225	1.0000000	99.9968	828.1368072	759.9984985	0.0000000	759.9984985	0.0000000	759.9984985	759.9984985	1.0000	0	1	0.00														
27	0.05	0.95	9.6716615	1.0159299	89.4485	545.1141843	514.3268207	263.5079926	496.3939754	1.0000	760.0019679	760.0019679	1.0000	0.346853	0.653147	0.05														
28	0.10	0.90	5.9155785	1.0567274	87.7862	509.0186673	482.5045469	301.1139878	458.8882001	1.0000	760.0021879	760.0021879	1.0000	0.396203	0.603797	0.10														
29	0.15	0.85	4.0397965	1.1154979	87.5928	504.9535117	478.9116497	305.9106679	454.0911875	1.0000	760.0018554	760.0018554	1.0000	0.402514	0.597486	0.15														
30	0.20	0.80	2.9951801	1.1881346	87.6693	506.5576676	480.3296708	303.4462931	456.3570528	1.0000	760.0033458	760.0033458	1.0000	0.399271	0.600729	0.20														
31	0.25	0.75	2.3659165	1.2719828	87.7408	508.0605025	481.6579829	300.5071877	459.9539993	1.0000	760.0025869	760.0025869	1.0000	0.395404	0.604596	0.25														
32	0.30	0.70	1.9622525	1.3651959	87.7616	508.5002694	482.0464765	299.3417699	460.6614976	1.0000	760.0032675	760.0032675	1.0000	0.393871	0.606129	0.30														
33	0.35	0.65	1.6906802	1.4664041	87.7496	508.2462286	481.8219881	300.7486454	459.2547310	1.0000	760.0033763	760.0033763	1.0000	0.395722	0.604278	0.35														
34	0.40	0.60	1.5011733	1.5745351	87.7373	507.9872292	481.5931105	305.0307538	454.9711423	1.0000	760.0018961	760.0018961	1.0000	0.401356	0.598644	0.40														
35	0.45	0.55	1.3652125	1.6897112	87.7579	508.4210964	481.9765145	312.3462775	447.6555204	1.0000	760.0017979	760.0017979	1.0000	0.410962	0.589018	0.45														
36	0.50	0.50	1.2656512	1.8081896	87.8409	510.1725314	483.5240236	322.8502449	437.1515491	1.0000	760.0017941	760.0017941	1.0000	0.424803	0.575197	0.50														
37	0.55	0.45	1.1917053	1.9323252	88.0122	513.8038354	486.7314234	336.7665196	423.235323	1.0000	760.0020509	760.0020509	1.0000	0.443114	0.556886	0.55														
38	0.60	0.40	1.1363251	2.0605477	88.2952	519.6490936	492.0677216	354.4305345	405.5716104	1.0000	760.002448	760.002448	1.0000	0.463364	0.533644	0.60														
39	0.65	0.35	1.0947455	2.1923462	88.7119	528.8616072	500.0158255	376.3297642	383.6727274	1.0000	760.0024916	760.0024916	1.0000	0.495171	0.504829	0.65														
40	0.70	0.30	1.0636507	2.3272590	89.2848	541.4660654	511.169546	403.151533	356.8504556	1.0000	760.0019688	760.0019688	1.0000	0.530463	0.469537	0.70														
41	0.75	0.25	1.0406730	2.4648665	90.0380	558.4264174	526.0281088	435.8544735	324.1472636	1.0000	760.0017372	760.0017372	1.0000	0.573493	0.426507	0.75														
42	0.80	0.20	1.0240835	2.6047860	90.9997	580.7289194	545.5915195	475.7719074	284.1472636	1.0000	760.0017346	760.0017346	1.0000	0.626016	0.373984	0.80														
43	0.85	0.15	1.0125934	2.7466675	92.2035	609.7061641	570.9377371	524.7767788	235.2264185	1.0000	760.0031974	760.0031974	1.0000	0.690496	0.309504	0.85														
44	0.90	0.10	1.0052250	2.8901907	93.6921	647.2181767	603.6345531	565.5398902	174.4618998	1.0000	760.0017901	760.0017901	1.0000	0.770447	0.229553	0.90														
45	0.95	0.05	1.0012239	3.0350624	95.5214	695.9672457	645.9451174	661.9781194	98.0241874	1.0000	760.0023058	760.0023058	1.0000	0.871024	0.128976	0.95														
46	1.00	0.00	1.0000000	3.1810140	97.7668	760.0016289	701.2358964	760.0016289	0.0000000	1.0000	760.0016289	760.0016289	1.0000	1.000002	-0.000002	1.00														

† Con el complemento "Solver" se modifica cada celda T (°C) de la columna E, teniendo como celda objetivo la celda correspondiente P\_tot/P\_trab en la columna K, ajustandola a un valor de 1.0 (Método Standard LSORG Non linear)

Puedes instalar el complemento desde el siguiente enlace:  
[https://chrome.google.com/webstore/detail/solver/ienncicbckkaliflbomasohaldobbb?utm\\_source=partnerlink](https://chrome.google.com/webstore/detail/solver/ienncicbckkaliflbomasohaldobbb?utm_source=partnerlink)

Agrega 1000 más filas al final.

+
Equilibrio
Base de Datos
Datos del usuario
Líneas de Tendencia
Resolución McCabe-Thiele
Torre

Posteriormente se realizó un cuadro para calcular el equilibrio ( $x$ - $y$ ) y la temperatura de saturación a la presión de trabajo. En la primera columna se colocan valores de  $x_1$  desde 0 hasta 1. En la segunda columna se colocan los respectivos valores de  $x_2$  los cuales se obtienen mediante  $x_2 = 1 - x_1$ . En la tercera columna se calculan los valores del *coeficiente de actividad* ( $\gamma$ ) para el compuesto 1, este se calcula mediante la ecuación (IV.8) por lo que en la celda se escribe la siguiente fórmula:

$$=EXP(A.12*((A.21*B32)/(A.12*A32+A.21*B32))^2)$$

En donde A32 es la celda en donde se encuentra el valor de  $x_1$  y en B32 se encuentra el valor de  $x_2$ . Este cálculo se *arrastra* hacia abajo para que se inserte en las celdas inferiores y el cálculo se realice para todos los valores de  $x_1$ . Como se había mencionado en el Marco Teórico, el coeficiente de actividad de ambos componentes se utiliza para corregir la idealidad de las soluciones líquidas y se aplica aquí para obtener el equilibrio ya que la mayoría de sistemas son no-ideales.

En la cuarta columna, correspondiente a la columna D en la Figura No. XIII.5 se realiza el cálculo del coeficiente de actividad para el segundo compuesto de acuerdo a la ecuación (IV.9). La fórmula en esta columna es por tanto:

$$=exp(A.21*((A.12*A32)/(A.12*A32+A.21*B32))^2)$$

La columna E se reserva para la temperatura con la cual se calculará la presión de saturación  $P^{sat}$ . Se utiliza en °C ya que en la ecuación (IV.6) se utilizaran las constantes del *Manual del Ingeniero Químico* (Green y Perry, 2008) lo cual requiere que la temperatura esté en estas unidades. La temperatura, debe ser la temperatura de saturación  $T_{sat}$  sin embargo, al ser un valor requerido para el cálculo, debe ser ingresado un valor arbitrario al principio para luego resolverse mediante *iteraciones* hasta lograr el equilibrio tal y como se verá posteriormente. Ahora, la presión de saturación del primer componente ( $P_1^{sat}$ ) se calcula en la columna F mediante la ecuación de Antoine. La fórmula en esta columna es:

$$=10^{(A.1-(B.1/(E32+C.1)))}$$

En esta fórmula E32 es la temperatura (°C) y A.1, B.1 y C.1 son las constantes A, B y C de Antoine. Para obtener  $P_2^{sat}$ , en la columna G, la fórmula correspondiente es:

$$=10^{(A.2-(B.2/(E32+C.2)))}$$

Luego, la presión parcial del compuesto para sistemas no ideales está dada por la ecuación (IV.7) la cual relaciona la composición, el coeficiente de actividad y la presión de saturación del componente  $i$  de la forma  $y_i P = x_i \gamma_i P_i^{sat}$  por tanto en la columna H se realiza el cálculo para  $y_1 P$  y en la columna I se realiza para  $y_2 P$  mediante las fórmulas respectivas:

$$\begin{aligned} &=A32*C32*F32 \\ &=B32*D32*G32 \end{aligned}$$

De acuerdo a la ecuación (IV.4) la presión total está dada por  $P = y_1 P + y_2 P$  por tanto en la columna J se suman los valores de las columnas H e I para obtener la presión total:

$$=H32+I32$$

En función de la temperatura, este valor de la presión total (la suma de ambos componentes) será diferente. El objetivo es que esta presión sea la misma que la presión de trabajo para que realmente los valores obtenidos sean los valores en el equilibrio. Debe realizarse un proceso iterativo en el que se modifica repetidamente el valor de la temperatura, en la columna E, hasta que la presión total es la deseada. Este procedimiento se le conoce como *Cálculo de la temperatura del punto de burbuja*. Para facilitar este proceso se agrega en la columna K la operación  $P_{tot}/P_{trab}$ , se busca que esta razón sea igual a 1 ya que esto indicaría que los valores son iguales.

=J32/P.trabTorr

Antes de realizar las iteraciones se agregan tres columnas más. En la columna L se calcula  $y_1$  mediante  $y_1 = y_1 P/P_{trab}$ :

=H32/P.trabTorr

En la columna M se calcula  $y_2 = 1 - y_1$ , en la celda la fórmula sería:

=1-L32

En la columna N se hace referencia a los valores de  $x_1$  para poder graficar la diagonal de 45°.

Para realizar las iteraciones con el objetivo que en cada fila se alcance  $P_{tot}$  se utiliza el complemento **Solver** que es un análogo a la herramienta del mismo nombre que se utiliza en Microsoft® Excel. Este complemento se puede instalar desde el menú **Complementos>Obtener complementos** y buscando la opción *Solver* de Fronline Systems Inc. y añadiéndolo a la Hojas de cálculo de Google<sup>1</sup>.

Para utilizar el complemento ir al menú **Complementos>Solver>Start** con lo cual aparece una ventana en el lado derecho de la pantalla, tal y como se puede apreciar en la Figura XIII.6. En esta ventana se deben llenar los campos de la siguiente manera:

1. En el campo *Set Objective* colocar la celda objetivo, en este caso una de las celdas de la columna K (p.ej. K32)
2. En *To* seleccionar *Value Of* y en el campo colocar 1 ya que deseamos que el valor de  $P_{tot}/P_{trab}$  sea igual a 1
3. En el campo *By Changing* colocar la celda que se debe variar es decir la celda correspondiente de la columna E (p.ej. E32) la cual contiene la  $T$  que se colocó arbitrariamente al inicio
4. En *Solving Method* elegir el método **Standard LSGRG Non linear** ya que la relación entre la temperatura de saturación y la presión total del sistema es No-lineal
5. Presionar *Solve* con lo que el complemento buscará el valor de  $t$  que logre el objetivo

Cuando el valor de la temperatura no sea el valor de saturación, el valor en la columna K tendrá una fuente Azul en negrita (p.ej. **1.0226**) pero al resolver cada iteración adecuadamente el valor cambiará a letra normal en color negro. (ej. 1.0000). Esto se realizó mediante la opción *Formato condicional* con el objetivo de facilitar la identificación de las iteraciones ya realizadas.

Una vez realizadas todas las iteraciones, desde  $x_1 = 0$  hasta  $x_1 = 1$  se han obtenido los datos de equilibrio, es decir  $x_1$ ,  $y_1$  y  $T_{sat}$ .

<sup>1</sup>También puede añadirse el complemento desde el siguiente enlace:  
[https://chrome.google.com/webstore/detail/solver/iennicjichkeiajiflbcmaaohildohpb?utm\\_source=permalink](https://chrome.google.com/webstore/detail/solver/iennicjichkeiajiflbcmaaohildohpb?utm_source=permalink)

Figura XIII.6: Complemento Solver utilizado en conjunto con la hoja de cálculo

**Paso 2** Presión de trabajo

Ingresar la presión de trabajo:

1   Atm	
760   Torr	
14.70   Psi	

**Cálculo de equilibrio a la presión de trabajo**

**Paso 3**

K1	Presión de saturación										K2	
	x1	x2	y1	y2	T (°C)	P. sat (Torr)	P. sat (Torr)	y1P (Torr)	y2P (Torr)	P. tot. (Torr)		P. totP (Torr)
31	0.00	1.00	18.3476225	1.0000000	101.00000	860.8733394	767.7409262	0.0000000	767.7409262	767.7409262	1.0385	0
32	0.05	0.95	9.6716615	1.0159299	101.00000	860.8733394	767.7409262	416.3037753	760.2750512	1176.5786265	1.5481	0.547768
33	0.10	0.90	5.915785	1.0567274	101.00000	860.8733394	767.7409262	509.2563806	749.1846825	1258.4410631	1.6558	0.670074
34	0.15	0.85	4.0387965	1.1154979	101.00000	860.8733394	767.7409262	521.5338286	746.9148285	1268.4486570	1.6690	0.686229
35	0.20	0.80	2.9951801	1.1881346	101.00000	860.8733394	767.7409262	515.6941457	748.7598195	1264.4479652	1.6637	0.678545
36	0.25	0.75	2.3659165	1.2719828	101.00000	860.8733394	767.7409262	509.1886199	751.4947006	1260.6833205	1.6588	0.669985
37	0.30	0.70	1.9622525	1.3651959	101.00000	860.8733394	767.7409262	506.7524569	752.7944555	1259.5697013	1.6573	0.666810
38	0.35	0.65	1.6906802	1.4664041	101.00000	860.8733394	767.7409262	509.4115394	750.9452418	1260.2567752	1.6582	0.670278
39	0.40	0.60	1.5011733	1.5745351	101.00000	860.8733394	767.7409262	516.9280418	744.1954240	1261.1234658	1.6594	0.680168
40	0.45	0.55	1.3652125	1.6887112	101.00000	860.8733394	767.7409262	528.8737718	731.6467996	1260.5205714	1.6586	0.695887
41	0.50	0.50	1.2656512	1.8081896	101.00000	860.8733394	767.7409262	544.7826987	712.1924650	1256.9751637	1.6539	0.716819
42	0.55	0.45	1.1917053	1.9323252	101.00000	860.8733394	767.7409262	564.2493333	694.9772466	1249.2262798	1.6437	0.742433
43	0.60	0.40	1.1363251	2.0605477	101.00000	860.8733394	767.7409262	586.5391743	649.2711104	1236.2102848	1.6266	0.772288
44	0.65	0.35	1.0947455	2.1923462	101.00000	860.8733394	767.7409262	612.5841929	604.4502879	1217.0344807	1.6014	0.803362
45	0.70	0.30	1.0636507	2.3272590	101.00000	860.8733394	767.7409262	640.9679418	549.9831416	1190.9510834	1.5670	0.843379
46	0.75	0.25	1.0406730	2.4648665	101.00000	860.8733394	767.7409262	671.9157340	485.1190516	1157.3347856	1.5228	0.884100
47	0.80	0.20	1.0240835	2.6047860	101.00000	860.8733394	767.7409262	705.2849222	410.3793026	1115.6642248	1.4680	0.928006
48	0.85	0.15	1.0125934	2.7466675	101.00000	860.8733394	767.7409262	740.9574720	324.5493594	1065.5068313	1.4020	0.974944
49	0.90	0.10	1.0052250	2.8901907	101.00000	860.8733394	767.7409262	778.8342460	227.6721534	1006.5063994	1.3244	1.024782
50	0.95	0.05	1.0012239	3.0359624	101.00000	860.8733394	767.7409262	818.8306517	119.5421439	988.8727956	1.2347	1.077409
51	1.00	0.00	1.0000000	3.1810140	101.00000	860.8733394	767.7409262	860.8733394	0.0000000	860.8733394	1.1327	1.132728

! Con el complemento "Solver" se modifica cada celda T (°C) de la columna E, teniendo como celda objetivo la celda correspondiente P\_tot/P\_trab en la columna K, ajustandola a un valor de 1.0 (Método Standard LSGRG Non linear)

Puedes instalar el complemento desde el siguiente enlace:  
[https://chrome.google.com/webstore/detail/solver/leannicichkeisifibomasohlidobbbbutm\\_source=parmalink](https://chrome.google.com/webstore/detail/solver/leannicichkeisifibomasohlidobbbbutm_source=parmalink)

Set Objective: K32

To:  Max  Min  Value Of: 1

By Changing Variable Cells: E32

Subject to the Constraints:

Add Change Delete

Solving Method: Standard LSGRG Nonlinear

Reset All Insert Example

Solve Options

Copyright © 2014 Frontline Systems, Inc.

Buscar en el menú (Alt+):

132/P, trabTorr

Resolución McCabe-Thiele

Torre

## 2. Base de datos

Debido a que el procedimiento para calcular el equilibrio requiere invertir tiempo en realizar las iteraciones, se creó una base de datos de los sistemas del Cuadro IV.1 a dos presiones: 1.00 atm y 0.978 atm. Se escogieron estas presiones ya que, como se pretende que este documento sea utilizado en la clase de Transferencia de Masa para la resolución de problemas, la mayoría de los problemas en los libros de Treybal (1988), Van Winkle (1967) y Benítez (1967) indican que el sistema se opera a presión atmosférica. Se añadió también la información a 0.978 atm ya que esta es la presión promedio a la que se encuentra el Laboratorio de Operaciones Unitarias de la Universidad del Valle de Guatemala.

Tal y como se muestra en la Figura XIII.7 se añadió al principio un cuadro con todos los sistemas binarios trabajados, y se añade al lado una columna en la que se presenta la dirección de la primera celda en la que se encuentran los datos de dicho sistema (sin tomar en cuenta títulos). Por ejemplo, para el sistema 1-Propanol (1), Agua (2) se calculó el equilibrio a 1 atm realizando todas las iteraciones mediante el complemento *Solver*, una vez se tenían los datos de equilibrio estos se copiaron a la base de datos en el rango A31:C51, en el rango A30:C30 se encuentran los títulos de las columnas. Por tanto en la celda D5 se escribió la siguiente fórmula para obtener una cadena de texto con la dirección de la primera celda:

```
=CELDA("address",A31)
```

La misma fórmula aplica para todos los sistemas variando únicamente la celda en que se encuentran los datos del sistema. Para los datos a 0.978 atm las direcciones se encuentran en la columna E. Estas direcciones se utiliza posteriormente para extraer los datos de esta hoja. Todos los datos que se encuentran en esta base de datos se calcularon mediante la hoja para el cálculo de equilibrio según el procedimiento explicado anteriormente.

Como se aprecia en la Figura XIII.7 también se añadió un cuadro nombrado como *Usuario: Datos ingresados* y en este cuadro se importan los datos que el usuario ingrese, en caso de que utilice otro sistema, para usarse posteriormente en el método de McCabe-Thiele<sup>2</sup>. La importación de los datos de  $x_1$  se realiza en la primera celda (I5) mediante la siguiente fórmula:

```
=DESREF('Datos del usuario'!G7,0,1,21,1)
```

Una explicación más profunda de la función `=DESREF()` se presenta en el Anexo 2. En este caso el primer argumento referencia a la primera celda del rango en que se encuentran los datos. El segundo argumento es 0 ya que no se desea ningún desplazamiento entre las filas, el tercer argumento es 1 ya que los valores de  $x_1$  se encuentran en la segunda columna y se requiere una columna de desplazamiento, el cuarto argumento es 21 ya que este es el alto del rango que se desea importar y el último argumento indica el ancho y tomó el valor de 1 ya que se requiere importar solamente una columna. Para importar  $y_1$  y  $T$  se escriben en las celdas J5 y K5 de la Figura XIII.7 las siguientes fórmulas respectivamente:

```
=DESREF('Datos del usuario'!G7,0,2,21,1)
=DESREF('Datos del usuario'!G7,0,0,21,1)
```

<sup>2</sup>En la sección siguiente se amplía sobre la pestaña *Usuario: Datos ingresados*

Figura XIII.7: Captura de pantalla de la base de datos con valores de equilibrio

Buscar en el menú (Alt+F) 100% - \$ % 0.00 123 - Análisis 10 - B I S A - ☰ - ☱ - ☲ - ☳ - ☴ - ☵ - ☶ - ☷ - ☸ - ☹ - ☺ - ☻ - ☼ - ☽ - ☿ - ♀ - ♂ - ♁ - ♂ - ♃ - ♄ - ♅ - ♆ - ♇ - ♈ - ♉ - ♊ - ♋ - ♌ - ♍ - ♎ - ♏ - ♐ - ♑ - ♒ - ♓ - ☾ - ☽ - ☿

### Base de datos

Sistema: Usuario: Datos ingresados

x1	y1	T(°C)
0.00	0.0000	76.70
0.01	0.0412	75.80
0.03	0.0823	74.90
0.05	0.1189	74.00
0.06	0.1555	73.10
0.09	0.2108	71.70
0.11	0.2660	70.30
0.14	0.3325	68.60
0.20	0.4138	66.20
0.26	0.4950	63.80
0.39	0.6340	59.30
0.46	0.6905	57.30
0.53	0.7470	55.30
0.60	0.7980	53.80
0.66	0.8290	52.30
0.71	0.8535	51.35
0.76	0.8780	50.40
0.81	0.9050	49.36
0.86	0.9320	48.50
0.93	0.9660	47.40
1.00	1.0000	46.30

Presiones

1
0.978

Sistema	1.00 atm	0.978 atm
4	\$AS31	\$AS163
5	1-Propanol (1), Agua (2)	SES31
6	2-Propanol (1), Agua (2)	SES31
7	Acetato de etilo (1), Etanol (2)	SIS163
8	Acetato de metilo (1), Metanol (2)	SMS31
9	Acetona (1), Agua (2)	\$AS57
10	Acetona (1), Cloroforno (2)	SES57
11	Acetona (1), Metanol (2)	SIS189
12	Acetona (1), 1-butanol (2)	SMS57
13	Agua (1), Acido Acetico (2)	\$AS83
14	Agua (1), Acido Fórmico (2)	SES83
15	Cloroforno (1), Metanol (2)	SIS215
16	Etolol (1), Agua (2)	SMS83
17	Etolol (1), Benceno (2)	\$AS109
18	Metanol (1), Acetato de etilo (2)	SES109
19	Metanol (1), Agua (2)	SIS109
20	Metanol (1), Benceno (2)	SMS241
21	n-Hexano (1), Etanol (2)	\$AS135
22	Tetracloruro de carbono (1), Benceno (2)	SES135
23	Tetrahidrofurano (1), Agua (2)	SIS135
24	Usuario: Datos ingresados	SIS5

Presión: 1 Atm

Sistema: 1-Propanol (1), Agua (2)      Sistema: 2-Propanol (1), Agua (2)      Sistema: Acetato de etilo (1), Etanol (2)      Sistema: Acetato de metilo (1), Metanol (2)

x1	y1	T(°C)	x1	y1	T(°C)	x1	y1	T(°C)
0.00	0.0000	100.00	0.00	0.0000	78.57	0.00	0.0000	64.55
0.05	0.4209	86.42	0.05	0.1067	76.97	0.05	0.1419	61.93
0.10	0.4995	83.28	0.10	0.1880	75.77	0.10	0.2438	59.96
0.15	0.5247	82.30	0.15	0.2524	74.87	0.15	0.3203	58.46
0.20	0.5347	81.94	0.20	0.3052	74.17	0.20	0.3788	57.31
0.25	0.5405	81.76	0.25	0.3498	73.64	0.25	0.4277	56.41
0.30	0.5460	81.61	0.30	0.3887	73.24	0.30	0.4674	55.72

Base de Datos      Datos del usuario      Líneas de Tendencia      Resolución McCabe-Thiele      Torre

Figura XIII.8: Captura de pantalla de la base de datos de equilibrio de varios sistemas a 1 atm

$f_i$	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	
26																		
27	<b>Presión: 1 Atm</b>																	
28	<b>Sistema: 1-Propanol (1), Agua (2)</b>																	
29	$x_1$	$y_1$	$T(C)$	$x_1$	$y_1$	$T(C)$	$x_1$	$y_1$	$T(C)$	$x_1$	$y_1$	$T(C)$	$x_1$	$y_1$	$T(C)$	$x_1$	$y_1$	$T(C)$
30	0.00	0.0000	100.00	0.00	0.0000	100.00	0.00	0.0000	78.57	0.00	0.0000	78.57	0.00	0.0000	64.55	0.00	0.0000	64.55
31	0.05	0.3469	89.45	0.05	0.4209	86.42	0.05	0.1067	76.97	0.05	0.1067	76.97	0.05	0.1419	61.93	0.05	0.1419	61.93
32	0.10	0.3962	87.79	0.10	0.4995	83.28	0.10	0.1880	75.77	0.10	0.1880	75.77	0.10	0.2438	59.96	0.10	0.2438	59.96
33	0.15	0.4025	87.59	0.15	0.5247	82.30	0.15	0.2524	74.87	0.15	0.2524	74.87	0.15	0.3203	58.46	0.15	0.3203	58.46
34	0.20	0.3993	87.67	0.20	0.5347	81.94	0.20	0.3052	74.17	0.20	0.3052	74.17	0.20	0.3798	57.31	0.20	0.3798	57.31
35	0.25	0.3954	87.74	0.25	0.5405	81.76	0.25	0.3498	73.64	0.25	0.3498	73.64	0.25	0.4277	56.41	0.25	0.4277	56.41
36	0.30	0.3939	87.76	0.30	0.5460	81.61	0.30	0.3887	73.24	0.30	0.3887	73.24	0.30	0.4674	55.72	0.30	0.4674	55.72
37	0.35	0.3957	87.75	0.35	0.5530	81.46	0.35	0.4238	72.94	0.35	0.4238	72.94	0.35	0.5013	55.17	0.35	0.5013	55.17
38	0.40	0.4014	87.74	0.40	0.5624	81.28	0.40	0.4562	72.71	0.40	0.4562	72.71	0.40	0.5312	54.74	0.40	0.5312	54.74
39	0.45	0.4110	87.76	0.45	0.5747	81.11	0.45	0.4870	72.56	0.45	0.4870	72.56	0.45	0.5584	54.40	0.45	0.5584	54.40
40	0.50	0.4248	87.84	0.50	0.5902	80.94	0.50	0.5172	72.48	0.50	0.5172	72.48	0.50	0.5839	54.14	0.50	0.5839	54.14
41	0.55	0.4431	88.01	0.55	0.6090	80.80	0.55	0.5476	72.45	0.55	0.5476	72.45	0.55	0.6087	53.96	0.55	0.6087	53.96
42	0.60	0.4664	88.30	0.60	0.6316	80.70	0.60	0.5788	72.49	0.60	0.5788	72.49	0.60	0.6336	53.83	0.60	0.6336	53.83
43	0.65	0.4952	88.71	0.65	0.6580	80.65	0.65	0.6117	72.61	0.65	0.6117	72.61	0.65	0.6595	53.77	0.65	0.6595	53.77
44	0.70	0.5305	89.28	0.70	0.6888	80.65	0.70	0.6472	72.80	0.70	0.6472	72.80	0.70	0.6874	53.77	0.70	0.6874	53.77
45	0.75	0.5735	90.04	0.75	0.7244	80.73	0.75	0.6862	73.09	0.75	0.6862	73.09	0.75	0.7184	53.86	0.75	0.7184	53.86
46	0.80	0.6260	91.00	0.80	0.7652	80.89	0.80	0.7301	73.49	0.80	0.7301	73.49	0.80	0.7540	54.06	0.80	0.7540	54.06
47	0.85	0.6905	92.20	0.85	0.8122	81.15	0.85	0.7805	74.04	0.85	0.7805	74.04	0.85	0.7962	54.39	0.85	0.7962	54.39
48	0.90	0.7704	93.69	0.90	0.8661	81.50	0.90	0.8398	74.77	0.90	0.8398	74.77	0.90	0.8478	54.92	0.90	0.8478	54.92
49	0.95	0.8710	95.52	0.95	0.9282	81.97	0.95	0.9112	75.75	0.95	0.9112	75.75	0.95	0.9132	55.72	0.95	0.9132	55.72
50	1.00	1.0000	97.77	1.00	1.0000	82.56	1.00	1.0000	77.06	1.00	1.0000	77.06	1.00	1.0000	56.93	1.00	1.0000	56.93
51																		
52																		
53																		
54	<b>Sistema: Acetona (1), Agua (2)</b>																	
55	<b>Sistema: Acetona (1), Cloroformo (2)</b>																	
56	$x_1$	$y_1$	$T(C)$	$x_1$	$y_1$	$T(C)$	$x_1$	$y_1$	$T(C)$	$x_1$	$y_1$	$T(C)$	$x_1$	$y_1$	$T(C)$	$x_1$	$y_1$	$T(C)$
57	0.00	0.0000	100.00	0.00	0.0000	61.20	0.00	0.0000	64.55	0.00	0.0000	64.55	0.00	0.0000	117.73	0.00	0.0000	117.73
58	0.05	0.6067	76.92	0.05	0.0289	61.97	0.05	0.1091	62.88	0.05	0.1091	62.88	0.05	0.2221	112.18	0.05	0.2221	112.18
59	0.10	0.7348	68.46	0.10	0.0658	62.71	0.10	0.1966	61.53	0.10	0.1966	61.53	0.10	0.3717	107.84	0.10	0.3717	107.84
60	0.15	0.7825	64.57	0.15	0.1107	63.37	0.15	0.2887	60.41	0.15	0.2887	60.41	0.15	0.4781	104.38	0.15	0.4781	104.38
61	0.20	0.8047	62.61	0.20	0.1632	63.91	0.20	0.3296	59.49	0.20	0.3296	59.49	0.20	0.5568	101.57	0.20	0.5568	101.57
62	0.25	0.8162	61.58	0.25	0.2222	64.30	0.25	0.3824	58.71	0.25	0.3824	58.71	0.25	0.6168	99.27	0.25	0.6168	99.27
63	0.30	0.8225	61.03	0.30	0.2863	64.53	0.30	0.4290	58.06	0.30	0.4290	58.06	0.30	0.6634	97.39	0.30	0.6634	97.39

Figura XIII.9: Captura de pantalla de la base de datos de equilibrio de varios sistemas a 0.978 atm

$f_i$	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q
157	Presión: 0.978 Atm																
158	Sistema: 1-Propanol (1), Agua (2)																
159	Sistema: 2-Propanol (1), Agua (2)																
160	Sistema: Acetato de etilo (1), Etanol (2) Sistema: Acetato de metilo (1), Metanol (2)																
161	Sistema: Acetona (1), Agua (2)																
162	Sistema: Acetona (1), Cloroformo (2)																
163	Sistema: Acetona (1), Agua (2)																
164	Sistema: Acetona (1), Metanol (2)																
165	Sistema: Agua (1), 1-butanol (2)																
166	Sistema: Acetona (1), Agua (2)																
167	Sistema: Acetona (1), Metanol (2)																
168	Sistema: Acetona (1), Cloroformo (2)																
169	Sistema: Acetona (1), Agua (2)																
170	Sistema: Acetona (1), Metanol (2)																
171	Sistema: Acetona (1), Cloroformo (2)																
172	Sistema: Acetona (1), Agua (2)																
173	Sistema: Acetona (1), Metanol (2)																
174	Sistema: Acetona (1), Cloroformo (2)																
175	Sistema: Acetona (1), Agua (2)																
176	Sistema: Acetona (1), Metanol (2)																
177	Sistema: Acetona (1), Cloroformo (2)																
178	Sistema: Acetona (1), Agua (2)																
179	Sistema: Acetona (1), Metanol (2)																
180	Sistema: Acetona (1), Cloroformo (2)																
181	Sistema: Acetona (1), Agua (2)																
182	Sistema: Acetona (1), Metanol (2)																
183	Sistema: Acetona (1), Cloroformo (2)																
184	Sistema: Acetona (1), Agua (2)																
185	Sistema: Acetona (1), Metanol (2)																
186	Sistema: Acetona (1), Cloroformo (2)																
187	Sistema: Acetona (1), Agua (2)																
188	Sistema: Acetona (1), Metanol (2)																
189	Sistema: Acetona (1), Cloroformo (2)																
190	Sistema: Acetona (1), Agua (2)																
191	Sistema: Acetona (1), Metanol (2)																
192	Sistema: Acetona (1), Cloroformo (2)																
193	Sistema: Acetona (1), Agua (2)																
194	Sistema: Acetona (1), Metanol (2)																
195	Sistema: Acetona (1), Cloroformo (2)																
196	Sistema: Acetona (1), Agua (2)																
197	Sistema: Acetona (1), Metanol (2)																
198	Sistema: Acetona (1), Cloroformo (2)																
199	Sistema: Acetona (1), Agua (2)																
200	Sistema: Acetona (1), Metanol (2)																

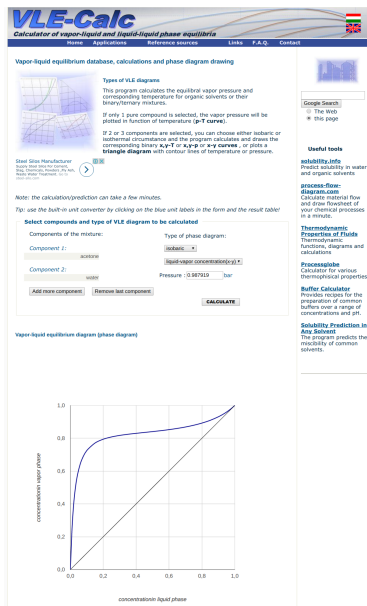
### 3. Ingreso de datos del usuario

Con el objetivo de que la Hoja de cálculo pueda ser utilizada con cualquier sistema se añadió una hoja (Figura XIII.11) al mismo documento en el que se permite que el usuario ingrese los siguientes datos:

1. Nombre del compuesto 1, que es el compuesto más volátil, y del compuesto 2
2. Masa molar de ambos compuestos, en g/mol
3. Presión de trabajo en atmósferas
4. Los datos de equilibrio ( $T_{sat}$ ,  $x_1$  y  $y_1$ )
5. Las constantes para  $C_{pL}$  ( $C_1$ ,  $C_2$ ,  $C_3$ ,  $C_4$  y  $C_5$ ) para ambos compuestos
6. Las constantes ( $C_1$ ,  $C_2$ ,  $C_3$  y  $C_4$ ) para calcular el calor latente de ambos compuestos

Los valores de masa molar pueden encontrarse en el *Manual del Ingeniero Químico* (Green y Perry, 2008) y se recomienda que las constantes para las capacidades caloríficas específicas y los calores latentes de los compuestos se obtengan de allí también para que coincidan las unidades, para  $C_{pL}$  en J/(kmol K) y para  $\lambda$  en J/kmol. En la 8va. edición del Manual Perry pueden encontrarse estos valores en los Cuadros 2-153, 2-150 y 2-141. Los datos de equilibrio pueden encontrarse en literatura de Ingeniería Química relacionada con el tema de Destilación. También pueden encontrarse referencias en internet como *VLE-Calc* la cual es una calculadora de equilibrio de fase vapor-líquido y líquido-líquido<sup>3</sup> y proporciona los datos  $T_{sat}$ ,  $x_1$  y  $y_1$  entre otros. Una captura de pantalla del sitio se muestra en la Figura XIII.10.

Figura XIII.10: Sitio web VLE-Calc para obtener datos de equilibrio



<sup>3</sup>Puede encontrarse en el siguiente enlace [http://vle-calc.com/phase\\_diagram.html](http://vle-calc.com/phase_diagram.html) (Anónimo, s.f.)

Figura XIII.11: Captura de pantalla de la hoja en la cual el usuario puede añadir datos de equilibrio para trabajar un sistema binario personalizado

10

ABCDEFGHIJKLM

## Ingreso de datos

**Ingreso de Datos (ingresar datos en las celdas blancas)**

Ingrese los compuestos a utilizar  
(Compuesto 1 es el más volátil)

Compuesto 1 | Disulfuro de carbono

Compuesto 2 | Tetracloruro de carbono

T (°C)	x1	y1	Diag. 45°	Valores x recomendados
76.70	0.00	0.00	0.00	0.00
75.80	0.01	0.04	0.01	0.01
74.90	0.03	0.08	0.03	0.03
74.00	0.05	0.12	0.05	0.05
73.10	0.06	0.16	0.06	0.06
71.70	0.09	0.21	0.09	0.09
70.30	0.11	0.27	0.11	0.11
68.60	0.14	0.33	0.14	0.14
66.20	0.20	0.41	0.20	0.20
63.80	0.26	0.50	0.26	0.26
59.30	0.39	0.63	0.39	0.39
57.30	0.46	0.69	0.46	0.46
55.30	0.53	0.75	0.53	0.53
53.80	0.60	0.79	0.60	0.60
52.30	0.66	0.83	0.66	0.66
51.35	0.71	0.85	0.71	0.75
50.40	0.76	0.88	0.76	0.80
49.36	0.81	0.91	0.81	0.85
48.50	0.86	0.93	0.86	0.90
47.40	0.93	0.97	0.93	0.95
46.30	1.00	1.00	1.00	1.00

Ingrese la Masa molar (g/mol)

Disulfuro del	76.135
Tetracloruro	153.820

P Trabajo

P Trabajo	1.00	atm
-----------	------	-----

Constantes para Capacidades caloríficas específicas en J/kmol K

	C1	C2	C3	C4	C5
Disulfuro de J/kmol K	85.600	-122.0000	0.5605	-0.00145	2.01E-06
Tetracloruro J/kmol K	-752.700	8966.1000	-30.3944	0.03446	

Constantes para Calor latente (λ) en J/kmol

Temperatura crítica en K	
--------------------------	--

Nota: Puede obtener la información del equilibrio en: <http://datacalc.com/phase-diagram.html>

+
Datos para equilibrio
Equilibrio
Base de Datos
Datos del usuario
Líneas de Tendencia
Resolución McCabe-Thiele
Torre

Explorar

#### 4. Líneas de tendencia

En la hoja de cálculo denominada *Líneas de tendencia* que se muestra en la Figura XIII.12 se obtienen las líneas de tendencia de la serie de datos  $y_1^*$  vs.  $x_1$  en equilibrio y de la serie  $T$  vs.  $x_1$ . También se colocan en esta hoja los valores necesarios para graficar cada una de las curvas y líneas de operación necesarias para el método de McCabe-Thiele. Se realizan en esta hoja también otras operaciones, necesarias para el método, pero que no necesitan ser mostradas en la hoja principal.

En la parte superior de la hoja de cálculo, celda B5 se importa el sistema que ingresó el usuario. Como a la celda utilizada se le asignó el nombre *SISTEMA* en la hoja de cálculo principal solamente se llama tal celda mediante `=SISTEMA`. Según el sistema a utilizar, p.ej. Etanol (1), Agua (2), en la celda E5 aparece la dirección de la celda, en la base de datos, en la que se encuentra dicho sistema. La celda E5 de la Figura XIII.12 contiene la siguiente fórmula que permite la búsqueda del sistema:

```
=BUSCARV(SISTEMA,'Base de Datos'!A5:E24,SI(presion=1,4,5))
```

En dicha fórmula el primer argumento es el valor a buscar, el segundo argumento es el rango en donde se realiza la búsqueda y el tercer argumento es el índice de la columna en que se encuentra el dato a importar. En este caso se aplica la función lógica `=SI()` ya que se debe importar el valor de la cuarta columna si la presión es 1 atm, y el valor de la quinta si el valor es diferente al de una atmósfera.

En la celda A10 se tiene la función mediante la cual se importan los datos del sistema a utilizar. La función utilizada es:

```
=DESREF(INDIRECTO(CONCATENAR("'Base de Datos'!",INDICE(E5))),0,0,21)
```

Se utiliza la función `=CONCATENAR()` para unir la cadena que indica la hoja en que se encuentran los datos ('Base de Datos!') con la cadena de la celda en que se encuentran los datos, (p.ej. `$M$83`). La función `=INDIRECTO()` convierte esta cadena de texto concatenada en una referencia de celda real. Finalmente la función `=DESREF()` se utiliza para importar la columna de datos con 0 filas de desplazamiento, 0 columnas de desplazamiento y 21 filas de alto. En las celdas B10 y C10 se hace la importación de  $y_1^*$  y  $T^{sat}$  mediante las siguientes fórmulas respectivas:

```
=DESREF(INDIRECTO(CONCATENAR("'Base de Datos'!",INDICE(E5))),0,1,21)
=DESREF(INDIRECTO(CONCATENAR("'Base de Datos'!",INDICE(E5))),0,2,21)
```

En esta misma tabla se hace la conversión de °C a Kelvin. La columna de diagonal de °45 se obtiene referenciando la celda en la columna A.

Seguidamente se desea obtener un polinomio que describa el comportamiento de la temperatura  $T^{sat}$  en Kelvin en relación a  $x_1$ . Se eligió obtener un polinomio de grado 10 ya que un grado más alto propicia una mayor convergencia con los datos obteniendo un  $r^2$  mayor a 0.99. Se realiza primero un cuadro de 22 filas y 11 columnas tal como se muestra en la Figura XIII.13. En la primera columna se referencian todas las temperaturas en Kelvin (p.ej. `=D10`), en la segunda columna se referencian todos los valores de  $x_1$ . De la columna tercera a la onceava (cols. C-K) se calculan los valores de  $x_1^2$ ,  $x_1^3$ ,  $x_1^4$ , etc. hasta llegar a la potencia 10 de  $x_1$ . Los valores de  $x_1$  se encuentran en la columna B por lo que las celdas en las columnas siguientes tienen las siguientes fórmulas:



Figura XIII.12: Datos del equilibrio - Hoja *Líneas de tendencia*

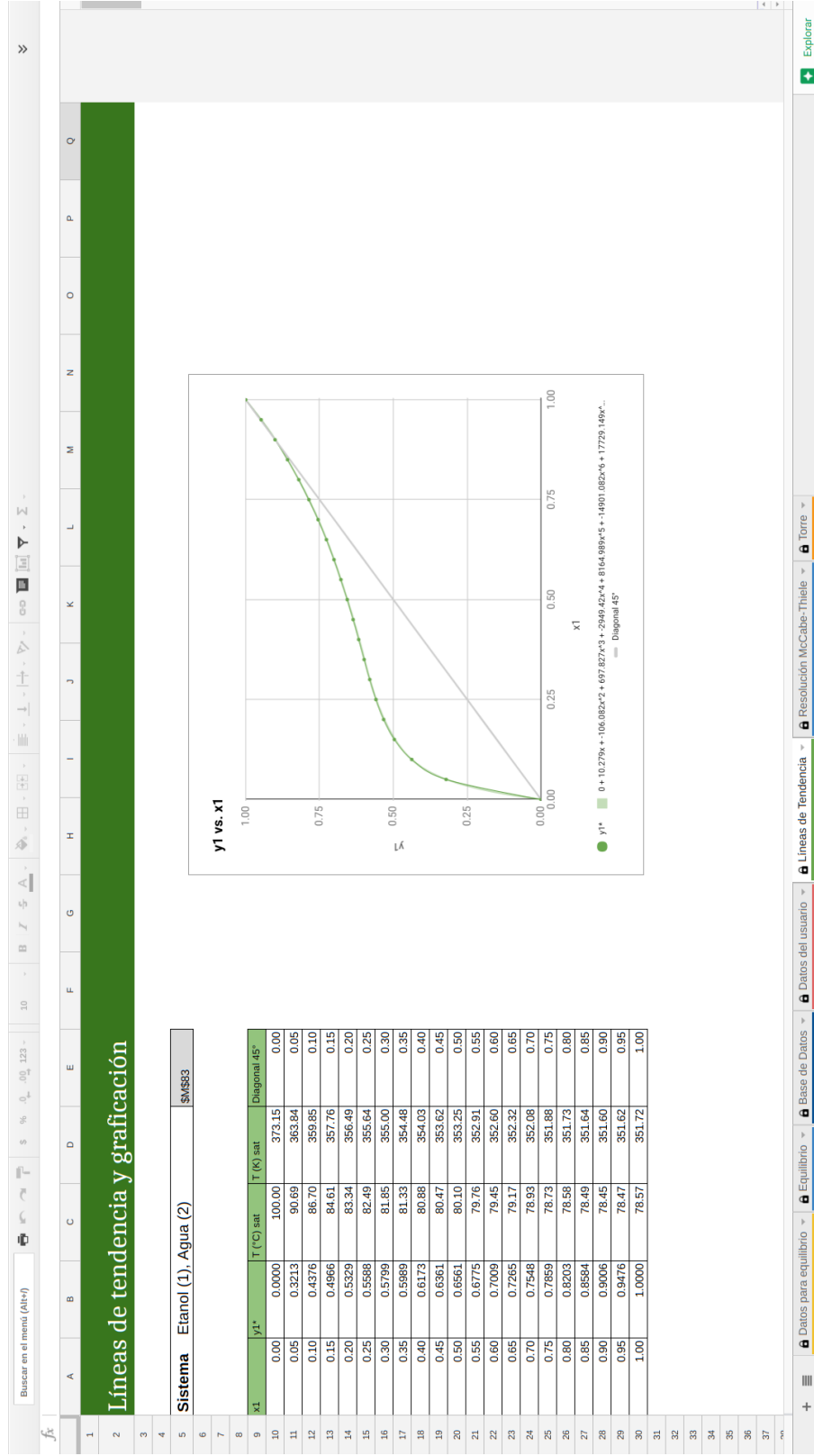


Figura XIII.13: Cálculo de la línea de tendencia  $T(K)$  vs.  $x$

$f_k$	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	
Línea de tendencia T(K) vs. x1																		
40	T(K) sat	x1	x1 <sup>2</sup>	x1 <sup>3</sup>	x1 <sup>4</sup>	x1 <sup>5</sup>	x1 <sup>6</sup>	x1 <sup>7</sup>	x1 <sup>8</sup>	x1 <sup>9</sup>	x1 <sup>10</sup>	x1 <sup>11</sup>	x1 <sup>12</sup>	x1 <sup>13</sup>	x1 <sup>14</sup>	x1 <sup>15</sup>	T(K) calculado % de error	
41		373.15	0.00	0.000	0.0000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	373.14	0.001%
42		363.84	0.05	0.003	0.00006	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	363.85	0.004%
43		359.85	0.10	0.010	0.00010	0.000010	0.000010	0.000001	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	359.82	0.006%
44		357.76	0.15	0.023	0.000506	0.000076	0.000011	0.000002	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	357.77	0.005%
45		356.49	0.20	0.040	0.001600	0.000320	0.000064	0.000013	0.000003	0.000001	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	356.51	0.004%
46		355.64	0.25	0.063	0.003906	0.000977	0.000244	0.000061	0.000015	0.000004	0.000001	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	355.63	0.003%
47		355.00	0.30	0.090	0.008100	0.002430	0.000729	0.000219	0.000066	0.000020	0.000006	0.000002	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	354.99	0.004%
48		354.48	0.35	0.123	0.015006	0.005252	0.001838	0.000643	0.000225	0.000079	0.000028	0.000010	0.000003	0.000000	0.000000	0.000000	354.48	0.000%
49		354.03	0.40	0.160	0.025600	0.010240	0.004096	0.001638	0.000655	0.000262	0.000105	0.000034	0.000011	0.000003	0.000000	0.000000	354.04	0.003%
50		353.62	0.45	0.203	0.041006	0.018453	0.008304	0.003737	0.001682	0.000757	0.000341	0.000153	0.000053	0.000019	0.000006	0.000002	353.63	0.002%
51		353.25	0.50	0.250	0.062500	0.031250	0.015625	0.007813	0.003906	0.001953	0.000977	0.000488	0.000244	0.000122	0.000061	0.000030	353.24	0.001%
52		352.91	0.55	0.303	0.091506	0.050328	0.027681	0.015224	0.008373	0.004605	0.002533	0.001460	0.000730	0.000365	0.000182	0.000091	352.90	0.003%
53		352.60	0.60	0.360	0.129600	0.077760	0.046656	0.027994	0.016796	0.010078	0.006047	0.003628	0.002177	0.001367	0.000842	0.000527	352.59	0.001%
54		352.32	0.65	0.423	0.178506	0.116029	0.075419	0.049022	0.031864	0.020712	0.013463	0.008633	0.005421	0.003444	0.002296	0.001597	352.33	0.002%
55		352.08	0.70	0.490	0.240100	0.168070	0.117649	0.082354	0.057648	0.040354	0.028248	0.019113	0.013085	0.009085	0.006314	0.004563	352.09	0.003%
56		351.88	0.75	0.563	0.422	0.316406	0.237305	0.177979	0.133484	0.100113	0.075085	0.056314	0.041441	0.030677	0.022491	0.016874	351.88	0.000%
57		351.73	0.80	0.640	0.512	0.409600	0.327680	0.262144	0.209715	0.167772	0.134218	0.107374	0.084678	0.064678	0.048678	0.036678	351.72	0.003%
58		351.64	0.85	0.723	0.614	0.522006	0.443705	0.377150	0.320577	0.272491	0.231617	0.196874	0.168678	0.144678	0.122678	0.102678	351.63	0.001%
59		351.60	0.90	0.810	0.729	0.656100	0.590490	0.531441	0.478297	0.430467	0.387420	0.348678	0.314678	0.284678	0.258678	0.234678	351.61	0.004%
60		351.62	0.95	0.903	0.857	0.814506	0.773781	0.735082	0.698337	0.663420	0.630249	0.598737	0.569249	0.541249	0.514249	0.488249	351.62	0.002%
61		351.72	1.00	1.000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	351.72	0.000%
Coeficientes de la línea de tendencia																		
62	m10	m9	m8	m7	m6	m5	m4	m3	m2	m1	mb							
63		18754.346	-102922.810	245175.641	-332765.012	284199.199	-159444.021	59745.081	-14990.460	2506.956	-280.342	373.145						
Estadísticas completas																		
64		18754.346	-102922.810	245175.641	-332765.012	284199.199	-159444.021	59745.081	-14990.460	2506.956	-280.342	373.145						
65		2960.725	14819.432	31658.871	37663.663	27298.110	12386.133	3477.802	574.418	49.889	1.767	0.016						
66		0.999950918	0.01625621024															
67		203738.6753	10															
68		538.408732	0.00264264372															

Explorar

Figura XIII.14: Cálculo de la línea de tendencia  $y$  vs.  $x$

$f_x$	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q
86	Línea de tendencia y vs. x																
87																	
88																	
89	$y_1$	$x_1$	$x_1^2$	$x_1^3$	$x_1^4$	$x_1^5$	$x_1^6$	$x_1^7$	$x_1^8$	$x_1^9$	$x_1^{10}$	$x_1^{11}$	$x_1^{12}$	$x_1^{13}$	$x_1^{14}$	$x_1^{15}$	$x_1^{16}$
90	0.00000	0.00	0.000	0.000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
91	0.32132	0.05	0.003	0.000	0.000006	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
92	0.43765	0.10	0.010	0.001	0.000100	0.000010	0.000001	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
93	0.49660	0.15	0.023	0.003	0.000506	0.000076	0.000011	0.000002	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
94	0.53289	0.20	0.040	0.008	0.001600	0.000320	0.000064	0.000013	0.000003	0.000001	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
95	0.55884	0.25	0.063	0.016	0.003906	0.000977	0.000244	0.000061	0.000015	0.000004	0.000001	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
96	0.57991	0.30	0.090	0.027	0.008100	0.002430	0.000729	0.000219	0.000066	0.000020	0.000006	0.000002	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
97	0.59886	0.35	0.123	0.043	0.015006	0.005252	0.001838	0.000643	0.000225	0.000079	0.000028	0.000009	0.000003	0.000001	0.000000	0.000000	0.000000
98	0.61728	0.40	0.160	0.064	0.025600	0.010240	0.004096	0.001638	0.000655	0.000262	0.000105	0.000037	0.000015	0.000005	0.000002	0.000000	0.000000
99	0.63613	0.45	0.203	0.091	0.041006	0.018453	0.008304	0.003737	0.001682	0.000757	0.000341	0.000154	0.000057	0.000023	0.000009	0.000003	0.000001
100	0.65605	0.50	0.250	0.125	0.062500	0.031250	0.015625	0.007813	0.003906	0.001953	0.000977	0.000488	0.000244	0.000122	0.000061	0.000030	0.000015
101	0.67752	0.55	0.303	0.166	0.091506	0.050328	0.027681	0.015224	0.008373	0.004695	0.002533	0.001266	0.000633	0.000316	0.000158	0.000079	0.000039
102	0.70090	0.60	0.360	0.216	0.129600	0.077760	0.046656	0.027994	0.016796	0.010078	0.006047	0.003628	0.002177	0.001361	0.000851	0.000532	0.000332
103	0.72854	0.65	0.423	0.275	0.178506	0.116029	0.075419	0.049022	0.031864	0.020712	0.013463	0.008342	0.005214	0.003259	0.002037	0.001324	0.000851
104	0.75475	0.70	0.490	0.343	0.240100	0.168070	0.117649	0.082354	0.057648	0.040354	0.028248	0.018348	0.012232	0.008064	0.005376	0.003584	0.002389
105	0.78588	0.75	0.563	0.422	0.316406	0.237905	0.177979	0.133484	0.100113	0.075085	0.056314	0.039444	0.027112	0.018348	0.012232	0.008064	0.005376
106	0.82028	0.80	0.640	0.512	0.409600	0.327680	0.262144	0.209715	0.167772	0.134218	0.107374	0.081111	0.059999	0.043777	0.032666	0.023444	0.016777
107	0.85837	0.85	0.723	0.614	0.522006	0.443705	0.377150	0.320577	0.272491	0.231617	0.196874	0.166874	0.140111	0.117333	0.100000	0.086666	0.076666
108	0.90062	0.90	0.810	0.729	0.656100	0.590490	0.531441	0.478297	0.430467	0.387420	0.348678	0.314678	0.284678	0.258678	0.235678	0.215678	0.198678
109	0.94760	0.95	0.903	0.857	0.814506	0.773781	0.735092	0.698337	0.663420	0.630249	0.598737	0.569678	0.542678	0.517678	0.494678	0.473678	0.454678
110	1.00000	1.00	1.000	1.000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000
111																	
112	Coeficientes de la línea de tendencia																
113	$m_{10}$	$m_9$	$m_8$	$m_7$	$m_6$	$m_5$	$m_4$	$m_3$	$m_2$	$m_1$	$m_b$						
114	-1022.092	5574.539	17680.612	17680.612	-14865.975	8149.183	-2945.076	697.189	-106.077	10.290	0.000						
115	174.29782	872.96957	1863.65005	2217.13175	1606.94689	729.12955	204.72640	33.81404	2.93737	0.10400	0.00096						
116	0.599991	0.000957															
117	110821.569	10															
118	1.015	0.0000092															
119	-1022.092	5574.539	-13171.594	17680.612	-14865.975	8149.183	-2945.076	697.189	-106.077	10.290	0.000						
120	174.29782	872.96957	1863.65005	2217.13175	1606.94689	729.12955	204.72640	33.81404	2.93737	0.10400	0.00096						
121	0.599991	0.000957															
122	110821.569	10															
123	1.015	0.0000092															
124																	

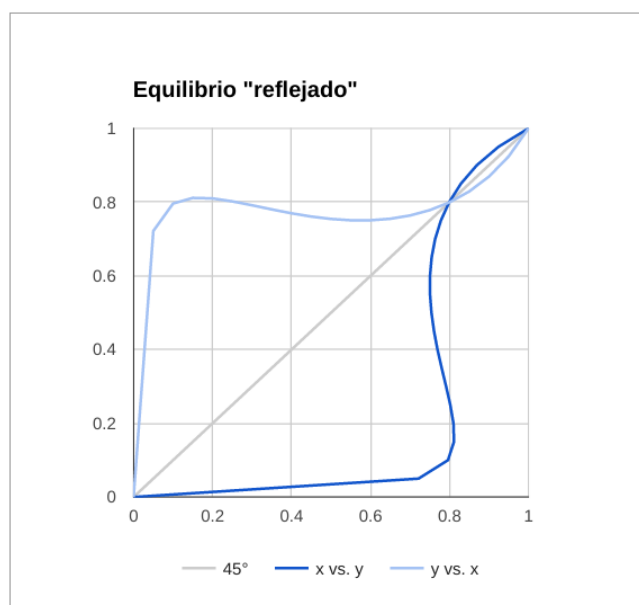
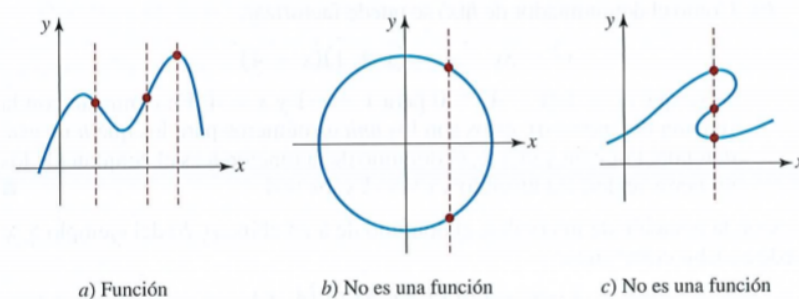
Figura XIII.15: Gráfica de los datos  $y$  vs.  $x$  y  $x$  vs.  $y$  para el sistema tetrahidrofurano-agua a 1 atm

Figura XIII.16: Prueba de la recta vertical



Fuente: Zill y Dewar (2008)

Con estos dos polinomios obtenidos ya se puede realizar parte del procedimiento de McCabe-Thiele. Es posible obtener la temperatura de saturación en función de cualquier composición  $x_1$  y se puede obtener el valor de  $y^*$  en equilibrio con cualquier  $x$ , sin embargo, a la hora de graficar *escaladamente* según el método, se hace necesario saber qué  $x^*$  en el equilibrio corresponde a un valor  $y$  dado, es decir se necesitaría una línea de tendencia en la cual los valores  $y$  fueran la variable independiente y los de  $x$  la dependiente. Al graficar  $x^*$  en función de  $y$  se obtiene una gráfica *reflejada* en la diagonal de  $45^\circ$  tal y como se puede apreciar en la Figura XIII.15.

Sin embargo al reflejar los datos se puede apreciar una dificultad que complica un poco la resolución del problema. De acuerdo a la definición matemática de una función se tiene que para cada  $x$  en el dominio existe solamente un valor de  $f(x)$  en el contradominio. Una forma de verificar que este requisito se cumpla es realizando la *prueba de la recta vertical* (Figura XIII.16) mediante la cual se debe imaginar rectas verticales cruzando la gráfica, si cada recta vertical toca únicamente un punto entonces se trata de una función, si una recta vertical cruza más de una vez entonces esta *no es* una función (Zill y Dewar, 2008).

Como se puede apreciar en la Figura XIII.15 esta no es una función ya que en varias rectas verticales imaginarias, p. ej en  $x, y = 0.8$  la recta es cruzada dos veces por la curva. Esto significa que no podemos obtener un polinomio, de ningún grado, que nos describa la relación  $x$  vs  $y$ . Esto ocurre en muchos otros sistemas, principalmente en aquellos que poseen azeótropo. Al no poderse obtener una línea de tendencia polinómica, que es el método más sencillo para obtener la correlación entre los datos, se optó por usar interpolaciones entre parejas de datos para obtener los valores de  $x$  correspondientes a un  $y$  dado. Dichas interpolaciones son posibles ya que los dos puntos entre los cuales se realiza la interpolación se encuentran tan cercanos que el segmento entre ellos puede considerarse una línea recta. La forma en que estas interpolaciones se realizarán automáticamente, sin que el usuario esté eligiendo parejas de datos, se desarrolla a continuación.

Primero se escribieron en una segunda columna (Figura XIII.18) varios valores de  $x_1$ , 41 valores en total (20 datos más que los que se tenían) para que las interpolaciones sean más acertadas. Luego en la primera columna se calculó el valor de  $y$  correspondiente para cada  $x$  utilizando los coeficientes de la línea de tendencia polinómica obtenida anteriormente.

```
=m10y*B138^10+m9y*B138^9+m8y*B138^8+m7y*B138^7+m6y*B138^6+m5y*B138^5
+m4y*B138^4+m3y*B138^3+m2y*B138^2+m1y*B138^1+mby
```

En esta función la celda B138 contiene el valor de  $x$  y por tanto no es más que la obtención de  $y$  a partir del siguiente polinomio:

$$y = m_{10} * x^{10} + m_9 * x^9 + m_8 * x^8 + m_7 * x^7 + m_6 * x^6 + m_5 * x^5 + m_4 * x^4 + m_3 * x^3 + m_2 * x^2 + m_1 * x^1 + m_b$$

A ambas columnas se les asigna el nombre `y.ascendente` y `x.ascendente` respectivamente. En la tercera columna se colocan los valores de  $y_1$  y  $x_1$  solamente que en orden invertido para utilizarse posteriormente con la función `=COINCIDIR()` al realizar las interpolaciones. Sin embargo esta inversión de datos debe realizarse automáticamente de manera que no tenga que estarlo haciendo el usuario cada vez que cambie sistema. Esto puede realizarse mediante la siguiente fórmula en la celda C138:

```
=INDICE(y.ascendente,FILAS($A138:A$178))
```

La función se arrastra hacia abajo para que se inserte en las demás celdas. Para las siguientes tres celdas, C139, C140 y C141 las fórmulas son respectivamente:

```
=INDICE(y.ascendente,FILAS($A139:A$178))
=INDICE(y.ascendente,FILAS($A140:A$178))
=INDICE(y.ascendente,FILAS($A141:A$178))
```

La forma en que estas fórmulas funcionan es que la función `=FILAS()` devuelve el número de filas en el intervalo, sin embargo el tamaño del intervalo cambia para cada fila en la que se arrastró la fórmula ya que la fila inicial del intervalo no se fija con el símbolo `$` mientras la fila final sí se fija. Por tanto en la celda C138 el intervalo tiene 41 filas<sup>4</sup>, mientras que en la celda C139 tiene 40, en la celda C140 tiene 39 y en la celda C141 tiene 38 filas. El intervalo disminuye conforme se baja en las filas.

Ahora la función `=INDICE()` lo que devuelve es el valor en el rango `y.ascendente` correspondiente al número indicado por la función `=FILAS()`. Como en la celda C138 el número devuelto es 41, la función índice devuelve el último valor del rango `y.ascendente`, en la celda C140 se devuelve

<sup>4</sup>El intervalo en este caso es exactamente el mismo que `y.ascendente` por lo que aparece en el mismo color y tiene la misma cantidad de filas.

el penúltimo y así sucesivamente hasta que en la última fila el tamaño del intervalo es 1 por lo que la función `=INDICE()` devuelve el primer valor. De esta manera se invierten automáticamente todos los datos. En la cuarta columna se obtienen los datos de  $x_1$  a la inversa, de la misma forma en que se obtuvieron los datos  $y_1$ , se muestran para las primeras tres celdas las fórmulas de este caso:

```
=INDICE(x.ascendente,FILAS($B138:B$178))
=INDICE(x.ascendente,FILAS($B139:B$178))
=INDICE(x.ascendente,FILAS($B140:B$178))
...
```

### Interpolación de datos

A continuación se detalla en qué manera se realizará la interpolación de datos más adelante. Se ejemplifica paso a paso para facilitar la comprensión del proceso.

Por ejemplo, se desea interpolar para el valor  $y = 0.600$  tal y como se muestra en la Figura XIII.17. Normalmente se realiza una interpolación lineal mediante la búsqueda visual del valor en la lista y el uso de la función `=PRONOSTICO()`.

```
PRONOSTICO(x; datos_y; datos_x)
```

Sin embargo necesitamos que en este caso la hoja de cálculo haga las búsquedas automáticamente y luego realice la interpolación lineal. Para ello se utilizan también las funciones `=COINCIDIR()` e `=INDICE()` cuyos detalles se en el Anexo 2 del presente trabajo.

Figura XIII.17: Explicación del proceso de interpolación

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1		y1 ascendente	x1 ascendente	y1 Descendente	x1 descendente		Valor y			
2	1	0.000	1.000	1.000	1.000		0.600			
3	2	0.201	0.975	0.975	0.975					
4	3	0.321	0.948	0.948	0.950					
5	4	0.393	0.923	0.923	0.925					
6	5	0.439	0.900	0.900	0.900					
7	6	0.471	0.879	0.879	0.875					
8	7	0.496	0.859	0.859	0.850					
9	8	0.515	0.839	0.839	0.825					
10	9	0.532	0.821	0.821	0.800					
11	10	0.547	0.803	0.803	0.775					
12	11	0.559	0.786	0.786	0.750					
13	12	0.571	0.770	0.770	0.725					
14	13	0.581	0.754	0.754	0.700					
15	14	0.590	0.740	0.740	0.675					
16	15	0.599	0.726	0.726	0.650					
17	16	0.608	0.713	0.713	0.625					
18	17	0.617	0.701	0.701	0.600					
19	18	0.626	0.689	0.689	0.575					
20	19	0.636	0.678	0.678	0.550					
21	20	0.646	0.667	0.667	0.525					
22	21	0.656	0.656	0.656	0.500					
23	22	0.667	0.646	0.646	0.475					
24	23	0.678	0.636	0.636	0.450					
25	24	0.689	0.626	0.626	0.425					
26	25	0.701	0.617	0.617	0.400					
27	26	0.713	0.608	0.608	0.375					
28	27	0.726	0.599	0.599	0.350					

COINCIDIR  
Posición relativa de los valores entre los que se encuentra el valor "y" a buscar  
Posición en el intervalo respectivo  
Dato inferior: 15  
Dato superior: 26

INDICE  
Valores obtenidos buscando el índice en los intervalos respectivos  
x: 0.350, y: 0.599  
x: 0.375, y: 0.608

PRONOSTICO  
PRONOSTICO(x; datos\_y; datos\_x)  
x: 0.3528

La función `=COINCIDIR()` nos devuelve la posición relativa del valor de búsqueda o el valor más cercano. Su sintaxis es:

```
COINCIDIR(valor_búsqueda; intervalo; tipo_búsqueda)
```

Si el tipo de búsqueda es 1 asume que el intervalo es ascendente y devuelve la posición del valor más alto que sea menor o igual al valor buscado. Si el tipo de búsqueda es -1 asume que el intervalo está invertido y devuelve la posición del valor más pequeño mayor o igual al valor buscado. Por lo tanto en el ejemplo presentado en la Figura XIII.17 la posición del dato inferior se obtiene en la celda H8 mediante la fórmula:

```
=COINCIDIR(yBuscar,y.ascendente,1)
```

Esta fórmula devolvió el valor 15 ya que como se puede apreciar, en el rango `y.ascendente` el valor más alto menor o igual a  $y = 0.600$  es  $y = 0.599$  que se encuentra en dicha posición. El dato superior se obtiene mediante la fórmula:

```
=COINCIDIR(yBuscar,y.descendente,-1)
```

Este devuelve el valor 26 que es la posición en el rango `y.descendente`. Luego debe obtenerse el valor, tanto de  $x$  como de  $y$  a partir de la posición. Esto se realiza mediante la función índice. Para los valores de  $x$  las funciones son:

```
=INDICE(x.ascendente,15)
=INDICE(x.descendente,26)
```

Para los valores de  $y$  las funciones son:

```
=INDICE(y.ascendente,15)
=INDICE(y.descendente,26)
```

Si se incluyera una función dentro de la otra las funciones serían:

```
=INDICE(x.ascendente,COINCIDIR(yBuscar,y.ascendente,1))
=INDICE(x.descendente,COINCIDIR(yBuscar,y.descendente,-1))
=INDICE(y.ascendente,COINCIDIR(yBuscar,y.ascendente,1))
=INDICE(y.descendente,COINCIDIR(yBuscar,y.descendente,-1))
```

Luego en la celda H21 se realiza el pronostico para el valor de  $y$  mediante:

```
=PRONOSTICO(yBuscar,G15:G16,H15:H16)
```

De esta manera se obtiene el valor  $x$  correspondiente.

Para ahorrar espacio en la hoja de cálculo y facilitar la interpolación se buscó que todo este proceso se pudiera realizar en la misma fila. Esto se puede realizar sabiendo que se pueden crear arreglos en una fórmula utilizando llaves {} y los siguientes signos de puntuación:

- **Coma (,):** se utiliza para separar columnas. Por ejemplo `={1,2}` crea el arreglo:

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \end{bmatrix}$$

- **Punto y coma (;):** se utiliza para separar filas. Por ejemplo `={1;2}` crea el arreglo:

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

Conociendo esto el proceso de interpolación se puede escribir en una sola celda mediante la fórmula:

```
=PRONOSTICO(yBuscar,
{INDICE(x.ascendente,COINCIDIR(yBuscar,y.ascendente,1));
INDICE(x.descendente, COINCIDIR(yBuscar,y.descendente,-1))},
{INDICE(y.ascendente,COINCIDIR(yBuscar,y.ascendente,1));
INDICE(y.descendente, COINCIDIR(yBuscar,y.descendente,-1))})
```

Esta forma de realizar las interpolaciones se utilizará mucho posteriormente.



En la Figura XIII.20 se muestran las parejas de valores necesarias para graficar todas las líneas del método de McCabe-Thiele. En esta hoja el usuario no realiza ninguna modificación pero los valores y el comportamiento de esta hoja es diferente en función al sistema que está trabajando el usuario. Por ello a partir de aquí la hoja *Líneas de Tendencia* está muy relacionada con la hoja *Resolución McCabe-Thiele* la cual es la hoja principal ya que llama valores calculados en dicha hoja o criterios elegidos por el usuario en dicha hoja y de la misma manera, desde esta hoja se exportan datos que se muestran en las celdas o en las gráficas de la hoja principal. Se explicará la resolución de dicha hoja más adelante pero en esta explicación se indicará adecuadamente cuando algún valor provenga de ella con el fin de hacer más clara la explicación de la hoja *Líneas de Tendencia*.

Para graficar la línea  $q$  sabemos que inicia en la diagonal, en la concentración de alimentación  $z_f$  por lo tanto el primer punto  $(z_f, z_f)$  se coloca en las celdas (B180, F180). Para graficar el segundo punto, debe de tomarse encuentra lo que se presenta en el Marco Teórico y que se muestra en la Figura IV.6 sobre la línea  $q$ , es decir que la pendiente de esta curva es diferente dependiendo del estado térmico de la alimentación. Como se explicará más adelante en la hoja *Resolución McCabe-Thiele* se solicita que el usuario ingrese el valor en el que la línea  $q$  intercepta con el equilibrio o en caso de existir tangencia solicita que ingrese el punto de tangencia y la celda en la que se ingresa dicho valor se nombra en la hoja de cálculo como `q.equilibrio.tan`. Por ello, con el fin de facilitarle al usuario la determinación de dicho dato en la gráfica se diagrama un segmento de la curva, ya sea que esta traspase el equilibrio o no. Para ello se establece lo que se denominó un *paso* que es un segundo valor de  $x$  que podrá utilizarse para graficar. Este se obtiene en la celda C180, llamada también `paso.q`. Este valor dependerá del tipo de alimentación:

- Vapor sobrecalentado  $x < z_f$
- Vapor saturado  $x < z_f$
- Mezcla de líquido y vapor  $x < z_f$
- Líquido saturado,  $x = z_f$  ya que es una línea vertical
- Líquido subenfriado  $x > z_f$

Se obtiene el nuevo  $x$  mediante:

```
=ifs(Alimentacion="Vapor sobrecalentado",zF-0.3,
Alimentacion="Vapor Saturado",zF-0.3,
Alimentacion="Líquido + Vapor",zF+0.3/qm,
Alimentacion="Líquido Saturado",zF,
Alimentacion="Líq. Subenfriado T.entrada",zF+0.3/qm,
Alimentacion="Líq. subenfriado Moles condensados",zF+0.3/qm)
```

Como se puede apreciar, en la fórmula anterior se suma o se resta un valor dependiendo de el tipo de alimentación. Se utiliza la función `=IFS()` ya que esta función devuelve un resultado diferente para cada condición programada y permite más de dos condiciones. En este caso las condiciones era cada uno de los posibles estados térmicos de la alimentación. En caso de ser Vapor sobrecalentado o Vapor saturado se resta 0.3 al valor de  $z_f$ . Este valor se eligió arbitrariamente pensando en que no es muy grande ni muy pequeño para los fines deseados. En los casos en que se tiene mezcla de líquido y vapor o un líquido subenfriado se tiene una pendiente de la línea  $q$ , es decir el valor  $q_m$  que se calcula en la hoja *Resolución McCabe-Thiele*. En estos casos se suma el valor  $0.3/q_m$  ya que si la pendiente es muy grande el valor de 0.3 puede resultar exagerado al graficar un segundo punto y se prefiere mejor dividir por su pendiente para disminuir la magnitud del valor. En caso de ser líquido saturado se deja el mismo valor de  $z_f$  porque la línea  $q$  es una línea vertical.

En la celda B181 se coloca el segundo valor de  $x$  para la línea  $q$ . En esta celda se tiene la siguiente fórmula:

```
=ifs(Tangencia="Sin Tangencia",
SI(ESBLANCO(q.equilibrio.tan),Paso.q,
SI(Alimentacion="Líquido Saturado",zF,q.equilibrio.tan)),
Tangencia="Tangencia en el enriquecimiento",
SI(ESBLANCO(q.equilibrio.tan),Paso.q,
SI(Alimentacion="Líquido Saturado",zF,(qb-EnRm.b)/(EnRm.m-qm))))
```

En esta fórmula la celda **Tangencia** es la celda de la hoja principal en la cual el usuario elige si hay tangencia o no en el sistema. La celda **q.equilibrio.tan** contiene el valor  $x$  ingresado por el usuario en el cual hay tangencia o la línea  $q$  toca el equilibrio. **EnRm.b** y **EnRm.m** es el intercepto y la pendiente de la línea de enriquecimiento para  $R$  mínimo, más adelante se explica cómo se obtienen estos valores. Por tanto el significado de la fórmula anterior es:

- Si no hay tangencia y el usuario no ha ingresado ningún valor de  $x$  en el que la línea  $q$  toca el equilibrio y la celda está en blanco entonces se devuelve el  $x$  obtenido anteriormente denominado **Paso.q** para graficar el segmento de recta que servirá de guía.
- Si el usuario ya ingresó un valor entonces **q.equilibrio.tan** será el segundo valor de  $x$  a menos que se trate de líquido saturado y el nuevo  $x$  se sabe que es  $z_f$
- Si hay tangencia pero el usuario no ha ingresado ningún valor de  $x$  en el que la curva de enriquecimiento toca el equilibrio entonces se devuelve el **Paso.q** para graficar el segmento guía
- Si hay tangencia y el usuario ya ingresó el valor de  $x$  en el que hay tangencia, si es líquido saturado será  $z_f$  pero si no entonces el segundo  $x$  será aquel en el que se crucen la curva de enriquecimiento y la línea  $q$  y ambos tengan el mismo valor de  $y$ . Esto se obtiene despejando la igualdad *op. enriquecimiento para R mínimo = curva q* como sigue:

$$m_{En.Rm}x + b_{En.Rm} = m_qx + b_q$$

$$m_{En.Rm}x - m_qx = b_q - b_{En.Rm}$$

$$x(m_{En.Rm} - m_q) = b_q - b_{En.Rm}$$

$$x = \frac{b_q - b_{En.Rm}}{m_{En.Rm} - m_q}$$

Luego para el valor de  $y$  del segundo punto para graficar la línea  $q$  se utiliza la siguiente fórmula en la celda **F181**:

```
=SI(ESBLANCO(T.ref),,SI(Alimentacion="Líquido saturado",
m10y*B181^10+m9y*B181^9+m8y*B181^8+m7y*B181^7+m6y*B181^6+m5y*B181^5
+m4y*B181^4+m3y*B181^3+m2y*B181^2+m1y*B181^1+mby,qm*B181+qb))
```

En esta fórmula:

- Si el usuario no ha ingresado una temperatura de referencia no se devuelve ningún valor, de esta manera no se obtiene ninguna gráfica
- Si ya se tiene una temperatura de referencia y se está alimentando un líquido saturado entonces el nuevo  $y$  se encuentra sobre la curva de equilibrio y se obtiene mediante la línea de tendencia  $y$  vs  $x$
- Si no es un líquido saturado se obtiene mediante la ecuación de la recta de la línea  $q$

Para graficar la línea  $x_D$  se utilizan los puntos  $(x_D, 0)$  y  $(x_D, x_D)$ , para la línea  $x_W$  es un poco diferente ya que depende del tipo de destilación. Si la destilación se realiza utilizando un rehervidor la línea llega hasta la diagonal, sin embargo si se realiza con vapor vivo en realidad se tiene un solo punto el cual está sobre el eje  $x$ . Los puntos a graficar serían  $(x_W, 0)$  y  $(x_W, x_W)$  o  $(0)$  por ello en la celda H187 de la Figura XIII.20 se tiene la siguiente fórmula:

```
=SI(TipoDest="Vapor vivo", 0 ,xW)
```

Para la línea de  $x_f$  se utilizan los puntos  $(x_f, 0)$  y  $(x_f, x_f)$ . Para diagramar la curva de enriquecimiento a partir de la cual se obtiene  $R_m$  se grafican los siguientes puntos:

1. Concentración de destilado sobre la diagonal,  $(x_D, x_D)$
2. Punto en el que la recta  $q$  toca el equilibrio o hay tangencia,  $(x_{eq.o.tan}, y^*)$ . En este caso el valor de  $y$  en el equilibrio se obtiene mediante:

```
=SI(EnRmOcultar="Ocultar", "", m10y*B193^10+m9y*B193^9+m8y*B193^8+m7y*B193^7+m6y*B193^6+m5y*B193^5+m4y*B193^4+m3y*B193^3+m2y*B193^2+m1y*B193^1+mby)
```

La celda EnRmOcultar contiene la elección del usuario para mostrar u ocultar esta línea de la gráfica. Este dato proviene de la hoja de cálculo principal.

3. Intercepción con el eje  $y$ . Con base en los dos puntos anteriores se obtiene la pendiente EnRm.m y el intercepto EnRm.b de la línea de operación por lo que este punto es:  $(0, \text{EnRm.b})$

La pendiente de esta recta (EnRm.m) se obtiene mediante:

```
=SI(ESBLANCO(T.ref), , PENDIENTE({xD;m10y*B193^10+m9y*B193^9+m8y*B193^8+m7y*B193^7+m6y*B193^6+m5y*B193^5+m4y*B193^4+m3y*B193^3+m2y*B193^2+m1y*B193^1+mby}, {xD;q.equilibrio.tan}))
```

El intercepto de esta (EnRm.b) se obtiene mediante:

```
=SI(ESBLANCO(T.ref), , INTERSECCION.EJE({xD;m10y*B193^10+m9y*B193^9+m8y*B193^8+m7y*B193^7+m6y*B193^6+m5y*B193^5+m4y*B193^4+m3y*B193^3+m2y*B193^2+m1y*B193^1+mby}, {xD;q.equilibrio.tan}))
```

A partir del intercepto de esta recta se obtiene el valor de  $R_m$ . El valor de  $R$  a utilizar puede ser un número de veces  $R_m$  o un valor de  $R$  específico en algunos casos. En cualquier caso a la celda que contiene el valor de  $R$  a utilizar se le nombró RelRef1.

Para la línea de enriquecimiento utilizando la relación de reflujo elegida se grafican únicamente dos puntos:  $(x_D, x_D)$  y  $(0, x_D/(R + 1))$ . Si aún no hay un valor de  $R$  entonces la fórmula en la celda K197, en la cual se calcula el valor del intercepto en el eje  $y$ , no devuelve valor alguno. La fórmula en esta celda es:

```
=SI(ESBLANCO('Resolución McCabe-Thiele'!I79), , xD/(RelRef1+1))
```

La pendiente y el intercepto de la curva de enriquecimiento (En.m y En.b) se obtienen respectivamente mediante las siguientes:

```
=PENDIENTE(K196:K197,B196:B197)
=INTERSECCION.EJE(K196:K197,B196:B197)
```

La línea de agotamiento inicia en el punto en que la línea de enriquecimiento cruza con la línea  $q$ . El valor  $x$  de este punto está dado por  $z_f$  en el caso de un líquido saturado y en los demás casos por la ecuación:

$$x = \frac{b_q - b_{En}}{m_{En} - m_q}$$

La fórmula en la celda B199 es:

```
=SI(Alimentacion="Líquido saturado",zF,(qb-En.b)/(En.m-qm))
```

El valor de  $y$  de este primer punto se obtiene en la celda L199 mediante la siguiente fórmula:

```
=SI(Alimentacion="Líquido saturado",En.m* zF+En.b,qm*B199+qb)
```

El segundo punto, es decir en donde termina la línea de agotamiento depende del tipo de destilación. El valor de  $x$  es en ambos casos el valor de  $x_W$ , el valor de  $y$  está sobre el eje  $x$  es decir en  $y = 0$  si se utiliza vapor vivo. Si se utiliza rehervidor el valor está en la diagonal, es decir en  $y = x_W$ . En la celda L200 que contiene este valor  $y$  se escribe la fórmula:

```
=SI(TipoDest="Vapor vivo", 0,xW)
```

Para obtener la pendiente y el intercepto de la curva de agotamiento se utiliza:

```
=PENDIENTE(L199:L200,B199:B200)
=INTERSECCION.EJE(L199:L200,B199:B200)
```

Luego, en la Figura XIII.20 también se obtienen los pares de datos para graficar las etapas mínimas, es decir el número de etapas entre el equilibrio y la diagonal. Se dibujan escalonadamente de acuerdo al Marco teórico. Para que esto logre realizarse adecuadamente las fórmulas deben seguir un orden específico. Las fórmulas de las celdas se escriben a continuación en el orden en que se programaron para lograr la escalera deseada.

Columna B	Columna M	N. fila
=xD	=xD	202
=SI(Mostrar.Nm="Mostrar",xD,)	=B203	203
=SI(B203>xW, PRONOSTICO(M203,... (ver sig. p.)	=M203	204
=B204	=B205	205
=SI(B205>xW, PRONOSTICO(M205,... (ver sig. p.)	=M205	206
=B206	=B207	207
...	...	...

En las celdas B202 y M202 se encuentra el primer punto en donde inicia la escalera es decir  $(x_D, x_D)$  ya que se inicia en la diagonal. En la celda B203 se incluye una orden particular. Como las etapas mínimas se están graficando en la misma gráfica que el resto de líneas de operación. En algún momento puede ser muy confuso y se le ha dado la opción del usuario para no mostrar estas líneas en la gráfica, esto se realiza en la celda que se denominó `Mostrar.Nm` la cual se encuentra

en la hoja principal y se explicará posteriormente. Si el usuario desea mostrar las etapas mínimas muestra  $x_D$ , si no lo desea, la fórmula no devuelve ningún valor y ninguna de las celdas posteriores obtiene valor alguno por lo que no hay pares de datos para graficar. En la celda M203 se llama el dato de la columna B es decir  $x_D$  por lo que seguimos sobre la diagonal. Esta repetición se realizó para que siempre se grafique el primer punto como guía y en la gráfica esté siempre indicada en la leyenda del gráfico.

El siguiente punto tiene que estar siempre a la misma altura ( $y = y_{anterior}$ ) pero trasladado horizontalmente hasta la curva de equilibrio. Por tanto el nuevo valor de  $x$  se obtiene interpolando el equilibrio para el valor de  $y$  anterior, que se encuentra en la celda M203, mediante la siguiente fórmula:

```
=SI(B203>xW, PRONOSTICO(M203,
{INDICE(x.ascendente,COINCIDIR(M203,y.ascendente,1));
INDICE(x.descendente,COINCIDIR(M203,y.descendente,-1))},
{INDICE(y.ascendente,COINCIDIR(M203,y.ascendente,1));
INDICE(y.descendente,COINCIDIR(M203,y.descendente,-1))}),)
```

Esta es una interpolación para encontrar el valor de  $x^*$  que corresponde a un  $y$  dado tal y como se había explicado antes de forma detallada. Se agrega al inicio únicamente la condición de que si el valor de  $y$  a interpolar es mayor a  $y = x_W$  en la diagonal se realice entonces la interpolación, si no es así, la celda no devuelve ningún valor y ya no se obtienen más datos en las celdas de abajo. El valor  $y$  correspondiente es =M203 es decir el valor  $y$  del punto anterior.

El siguiente punto tiene que estar sobre la diagonal es decir el valor  $x$  se mantiene y el nuevo valor  $y$  es  $y = x$ . Luego se vuelve a interpolar mediante:

```
=SI(B205>xW, PRONOSTICO(M205,
{INDICE(x.ascendente,COINCIDIR(M205,y.ascendente,1));
INDICE(x.descendente,COINCIDIR(M205,y.descendente,-1))},
{INDICE(y.ascendente,COINCIDIR(M205,y.ascendente,1));
INDICE(y.descendente,COINCIDIR(M205,y.descendente,-1))}),)
```

Y en adelante se repiten las fórmulas de manera intercalada. Para insertarlas en la hoja de cálculo de esta manera de forma sencilla se seleccionaron las dos celdas B204 y B205 y del pequeño cuadro que aparece en la esquina inferior derecha se *arrastran* las fórmulas hacia abajo. Al ser dos fórmulas diferentes se insertan de manera intercalada. Ser realizó lo mismo en ambas columnas.

Figura XIII.19: Cuadro para relleno de fórmulas

0.353	
0.353	

Para contar el número de etapas mínimas (celda D204) se cuenta el número de puntos graficados sin incluir el punto  $(x_D, x_D)$  y, ya que cada par de puntos (uno en el equilibrio y otro en la diagonal) representa una *grada*, este conteo se divide dentro de dos:

```
=(CONTAR(B204:B299))/2
```



Seguidamente, se obtienen los datos para graficar las etapas reales. Para esto se toma en cuenta las ecuaciones de las líneas de agotamiento y enriquecimiento, y también se toma en cuenta la Eficiencia de Murphree. Recordando del Marco Teórico la línea de agotamiento tiene la forma:

$$y = m_{en}x + b_{en}$$

Con los nombres utilizados en la hoja de cálculo sería:

$$y = \text{En.m } x + \text{En.b}$$

Para la línea de agotamiento se tiene:

$$y = m_{ago}x + b_{ago}$$

$$y = \text{Ago.m } x + \text{Ago.b}$$

La eficiencia de Murphree del vapor y del líquido está dada respectivamente por las ecuaciones (IV.37) y (IV.38):

$$E_{MV} = \frac{y_j - y_{j-1}}{y_j^* - y_{j-1}}$$

$$E_{ML} = \frac{x_j - x_{j-1}}{x_j^* - x_{j-1}}$$

En la hoja de cálculo se nombró a la eficiencia de Murphree, sea de vapor o de líquido según la elección del usuario, como Em y tal y como en las ecuaciones anteriores el valor real está dado por: `dato real=(dato en el equilibrio - dato etapa anterior) * Em + dato etapa anterior`

El valor de Em se encuentra en la celda D301 y se llama de la hoja principal mediante:

```
=ifs(Em.tipo="Em del líquido",Em.user,Em.tipo="Em del vapor",Em.user,
Em.tipo="Sin valor (usar Em=1)",1)
```

En la celda Em.tipo el usuario ha elegido el tipo de eficiencia a utilizar y si elige una opción diferente a  $E_M = 1$  entonces debe ingresar un valor para la eficiencia en la celda Em.user.

Luego se coloca en las celdas B301 y N301 de la Figura XIII.21 el primer dato a graficar sin embargo este depende del tipo de eficiencia a utilizar. En la Figura IV.12 del Marco Teórico se muestra la forma en que se realiza el procedimiento de escalonado cuando se tiene el valor de la eficiencia. Para aplicar la eficiencia del vapor se inicia de la parte inferior en  $(x_w, x_w)$  si se trabaja con rehervidor o  $(x_w, 0)$  si se trabaja con vapor vivo y la eficiencia se aplica verticalmente. Para la eficiencia del líquido,  $E_{ML}$  se inicia por la parte superior en  $(x_D, x_D)$  y la eficiencia se mide horizontalmente. Si no se tiene un valor de eficiencia por lo que se asume totalmente eficiente  $E_M = 1$ , puede iniciarse en la parte superior o la inferior, en este caso se eligió la parte superior  $(x_D, x_D)$ . Por ello, la fórmula en la celda B301 es:

```
=ifs(Em.tipo="Em del líquido",xD,Em.tipo="Em del vapor",xw,
Em.tipo="Sin valor (usar Em=1)",xD)
```

El valor de y correspondiente a este primer punto se obtiene en la celda N301 mediante:

```
=ifs(Em.tipo="Em del líquido",xD,Em.tipo="Em del vapor",
SI(TipoDest="Vapor vivo",0,xw),Em.tipo="Sin valor (usar Em=1)",xD)
```

Con este primer punto se obtiene luego el valor de la composición en el equilibrio en la columna C y la composición real en la columna D. Dicha composición es  $y$  si estamos trabajando con  $E_{MV}$  y  $x$  en los otros dos casos. Debido a esto los títulos de las columnas varían utilizando las siguientes fórmulas:

```
=SI(Em.tipo="Em del vapor","y eq","x eq")
=SI(Em.tipo="Em del vapor","y real","x real")
```

En la celda C302 el valor de equilibrio se obtiene mediante la fórmula:

```
=SI(ESBLANCO(N301),,SI(Em.tipo="Em del vapor",m10y*B301^10+
m9y*B301^9+m8y*B301^8+m7y*B301^7+m6y*B301^6+m5y*B301^5+m4y*B301^4+
m3y*B301^3+m2y*B301^2+m1y*B301^1+mby,PRONOSTICO(N301,
{INDICE(x.ascendente,COINCIDIR(N301,y.ascendente,1))};
INDICE(x.descendente,COINCIDIR(N301,y.descendente,-1))}),
{INDICE(y.ascendente,COINCIDIR(N301,y.ascendente,1))};
INDICE(y.descendente,COINCIDIR(N301,y.descendente,-1))}))
```

Esta fórmula significa:

- Si no hay un valor  $y$  anterior, no devuelve nada y se detiene el cálculo de puntos y la gráfica.
- Si hay un valor anterior y estamos trabajando con  $E_{MV}$ , es decir de abajo hacia arriba, obtener el  $y$  del equilibrio mediante la línea de tendencia.
- Para los otros dos casos, es decir de arriba a abajo, obtener el  $x$  de equilibrio mediante interpolación.

Luego en la celda D302 obtenemos el valor  $x$  o  $y$  real incluyendo ya la eficiencia de Murphree. Esto se logra mediante:

```
=SI(ESBLANCO(C302),,SI(Em.tipo="Em del vapor",
(C302-N301)*Em+N301,(C302-B301)*Em+B301))
```

En esta fórmula:

- Si no hay un valor en el equilibrio, no se devuelve ningún valor real.
- Si estamos trabajando con  $E_{MV}$  la resta es de valores  $y$  (el  $y$  anterior se encuentra en la columna N) y se devuelve un valor de  $y$  real.
- En los otros dos casos la resta es de valores  $x$  (el  $x$  anterior se encuentra en la columna B) y se devuelve un valor de  $x$  real.

A continuación se presenta el orden de las fórmulas en las celdas pero, ya que el procedimiento es diferente dependiendo del tipo de eficiencia que se utilice, las fórmulas resultan largas y complicadas. Para facilitar la comprensión se separan a continuación las fórmulas utilizadas en cada uno de los casos.

En general, si se utiliza  $E_{MV}$  entonces se diagrama de abajo hacia arriba y el orden de los valores  $x$  en la columna B y  $y$  en la columna N están dados por las fórmulas en el siguiente orden:

Columna B	Columna N	N.fila
=xW	=SI(TipoDest="Vapor vivo", 0, xW)	301
=SI(N301<xD, B301,)	=SI(N301<xD, D302,)	302
=SI(D302<Ago.yq, (D302-Ago.b)/Ago.m, (D302-En.b)/En.m)	=SI(N301<xD, D302,)	303
=SI(N303<xD, B303,)	=SI(N303<xD, D304,)	304
=SI(D304<Ago.yq, (D304-Ago.b)/Ago.m, (D304-En.b)/En.m)	=SI(N303<xD, D304,)	305
...	...	...

Si no se utiliza  $E_{MV}$ , es decir para  $E_{ML}$  o si no se usa ningún valor de eficiencia ( $E_M = 1$ ) entonces se diagrama de arriba hacia abajo y el orden de las fórmulas es el siguiente:

Columna B	Columna N	N.fila
=xD	=xD	301
=SI(B301>xW, D302,)	=SI(B301>xW, N301,)	302
=D302	=SI(B301>xW, SI(D302>Ago.xq, En.m*D302+En.b, Ago.m*D302+Ago.b),)	303
=SI(B303>xW, D304,)	=SI(B303>xW, N303,)	304
=D304	=SI(B303>xW, SI(D304>Ago.xq, En.m*D304+En.b, Ago.m*D304+Ago.b),)	305
...	...	...

En las celdas ambas opciones se realizan es decir se unifican en una sola fórmula por ejemplo para la celda B303 se tiene ambas fórmulas presentadas en los dos cuadros anteriores y se agrega, al inicio, la condición de que si no hay un valor de  $y$  anterior entonces la fórmula no devuelva nada:

```
=SI(ESBLANCO(N302),,SI(Em.tipo="Em del vapor",SI(D302<Ago.yq, (D302-Ago.b)/Ago.m, (D302-En.b)/En.m),D302))
```

Para la celda N303 de la Figura XIII.21 la fórmula es:

```
=SI(Em.tipo="Em del vapor",SI(N301<xD, D302,),SI(B301>xW, SI(D302>Ago.xq, En.m*D302+En.b, Ago.m*D302+Ago.b),))
```

Para contar el número de etapas reales, al igual que para contar los platos mínimos, se cuenta el número de puntos sin incluir el primero ya sea  $(x_D, x_D)$ ,  $(x_W, x_W)$  o  $(x_W, 0)$ , y se divide el conteo entre dos. La fórmula en este caso es:

```
=SI(ESBLANCO(Em),, CONTAR(B302:B398)/2)
```

Para determinar el número de etapa de alimentación, numerando las etapas desde la esquina superior derecha, iniciando en  $x_D$ , hasta la esquina inferior izquierda, se utilizó la columna P tal y como se muestra en la Figura XIII.21. En la celda P302 se escribió la siguiente fórmula:

```
=SI(Y(xW<=B302,B302<xD),  
SI(Em.tipo="Em del vapor", SI(D302<Ago.yq,0,1),SI(B301>Ago.xq,1,0)),)
```

En esta fórmula ocurre lo siguiente:

- Se evalúa si el valor de  $x$  en la celda B302 está en el rango entre  $x_D$  y  $x_W$  pudiendo ser igual a este último.
  - Si cumple con lo anterior evalúa si se está utilizando  $E_{MV}$ , de ser así evalúa si el valor de  $y$  nuevo es menor al valor  $y$  del intercepto entre el agotamiento y la línea  $q$ .
    - Si es menor entonces devuelve el valor 0 y la etapa actual se encuentra en la sección de agotamiento.
    - Si es mayor devuelve el valor 1 y la etapa actual se encuentra en la sección de enriquecimiento.
- Si no se está utilizando  $E_{MV}$  entonces se evalúa si el valor de  $x$  anterior es mayor al valor  $x$  del intercepto entre el agotamiento y la línea  $q$ .
  - Si es mayor entonces devuelve el valor 1 y la etapa actual se encuentra en la sección de enriquecimiento.
  - Si es menor entonces devuelve el valor 0 y la etapa actual se encuentra en el agotamiento.
- Si el valor de  $x$  de la celda B302 no está en el rango entre  $x_D$  y  $x_W$  entonces la fórmula no devuelve nada.

Esta celda se introduce en cada etapa es decir cada dos celdas, por ejemplo P302, P304, P306, etc. Luego en la celda P300 se hace el conteo de todas las etapas en la sección de enriquecimiento mediante:

```
=CONTAR.SI(P301:P398,"=1")
```

Figura XIII.21: Datos para graficar las etapas reales en escalera

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q
299																	
300			Etapas Reales y eq	9.000	y real												
301		0.046	0.046	0.6													
302		0.046	0.304	0.201												0	0.0458
303		0.075														0	0.201
304		0.075	0.392	0.316												0	0.316
305		0.096														1	0.316
306		0.096	0.433	0.386												1	0.386
307		0.182														1	0.386
308		0.182	0.520	0.467												1	0.467
309		0.315														1	0.467
310		0.315	0.586	0.539												1	0.539
311		0.433														1	0.539
312		0.433	0.629	0.593												1	0.593
313		0.523														1	0.593
314		0.523	0.666	0.637												1	0.637
315		0.596														1	0.637
316		0.596	0.699	0.674												1	0.674
317		0.658														1	0.674
318		0.658	0.730	0.708												1	0.708
319		0.713														1	0.708
320			0.762	0.740													
321																	
322																	
323																	
324																	
325																	
326																	
327																	
328																	
329																	
330																	
331																	
332																	
333																	
334																	
335																	
336																	
337																	

A continuación se explica cómo se obtuvieron los datos para graficar el pseudoequilibrio. Al igual que para la graficación de las etapas escalonadamente, las fórmulas de las celdas son diferentes si se está utilizando  $E_{MV}$  o  $E_{ML}$ . En caso de no utilizar un valor de eficiencia ( $E_M = 1$ ) no hay pseudoequilibrio ya que las etapas llegan directamente al equilibrio. Para facilitar la comprensión se separan a continuación las fórmulas utilizadas en cada uno de los casos.

Antes que nada se obtiene un valor que se suma a cada dato con el objetivo de tener 20 divisiones iguales entre  $x_D$  y  $x_W$ . Esto se realiza en la celda D399 de la Figura XIII.22 mediante:

$$=(x_D-x_W)/20$$

Si se utiliza  $E_{MV}$  se diagrama de abajo hacia arriba. Se escriben los 20 valores de  $x$  entre  $x_D$  y  $x_W$  con igual separación y se obtienen los valores  $y$  de operación y de equilibrio para luego restarse, multiplicarse por la eficiencia y sumar este valor al valor de operación y con esto se obtiene el valor del pseudoequilibrio.

Primero el valor del equilibrio se obtiene mediante la línea de tendencia, para cada  $x$  en la columna B. En la columna C se obtiene el valor de  $y$  mediante:

$$=m10y*B401^{10}+m9y*B401^9+m8y*B401^8+m7y*B401^7+m6y*B401^6+m5y*B401^5+m4y*B401^4+m3y*B401^3+m2y*B401^2+m1y*B401^1+mby$$

El valor del  $y$  de operación se obtiene en la columna D evaluando primero si el  $x$  es menor a la intersección entre la línea de agotamiento y la línea  $q$ . Si es así, se utiliza la ecuación de la recta del agotamiento, pero si es mayor se utiliza la ecuación de la recta del enriquecimiento:

$$=SI(B401<Ago.xq,Ago.m*B401+Ago.b,En.m*B401+En.b)$$

El orden de las fórmulas en las columnas B y O para cuando se utiliza  $E_{MV}$  es el siguiente:

Columna B	Columna O	N. fila
=xW	=(C401-D401)*Em+D401	401
=B401+\$D\$399	=(C402-D402)*Em+D402	402
=B402+\$D\$399	=(C403-D403)*Em+D403	403
...	...	...

Si se está utilizando  $E_{ML}$  entonces el procedimiento es diferente. Se inicia de arriba hacia abajo. Se utilizan 20 valores de  $y$  entre  $y = x_D$  y  $y = x_W$ , la fórmula es la misma que en el caso anterior y el valor del intervalo sigue siendo el de la celda D399. En este caso se debe obtener el  $x^*$  de equilibrio y el  $x$  de operación para cada uno de los 20 valores de  $y$ .

El valor  $x^*$  se obtiene mediante interpolación:

$$=PRONOSTICO(O401, \{INDICE(x.ascendente, COINCIDIR(O401, y.ascendente, 1)); INDICE(x.descendente, COINCIDIR(O401, y.descendente, -1))\}, \{INDICE(y.ascendente, COINCIDIR(O401, y.ascendente, 1)); INDICE(y.descendente, COINCIDIR(O401, y.descendente, -1))\})$$

Para valor de  $x$  de operación se evalúa si el valor de  $y$  actual es menor al de la intersección de la línea de agotamiento con la línea  $q$ , si es así, se utiliza la ecuación de la recta de agotamiento, si no, se utiliza la ecuación de la recta de enriquecimiento. El valor de  $x$  de una recta está dado por:

$$x = \frac{y - b}{m}$$

Por lo anterior el  $x$  de operación se obtiene mediante:

```
=SI(0401<Ago.yq,(0401-Ago.b)/Ago.m,(0401-En.b)/En.m)
```

El orden de las fórmulas en las columnas B y O para cuando se utiliza  $E_{ML}$  es el siguiente:

Columna B	Columna O	N.fila
=D401-(D401-C401)*Em	=x_W	401
=D402-(D402-C402)*Em	=0401+\$D\$399	402
=D403-(D403-C403)*Em	=0402+\$D\$399	403
...	...	...

Es así como se realizan ambos cálculos. Sin embargo, como en realidad se realizan en una misma celda al mismo tiempo, las fórmulas quedan más largas. A continuación se demuestra esto para la fila 402. En la columna B la fórmula es:

```
=ifs(Em.tipo="Em del vapor",B401+$D$399,Em.tipo="Em del líquido",
D402-(D402-C402)*Em,Em.tipo="Sin valor (usar Em=1)",)
```

En la columna C la fórmula es:

```
=ifs(Em.tipo="Em del vapor",m10y*B402^10+m9y*B402^9+
m8y*B402^8+m7y*B402^7+m6y*B402^6+m5y*B402^5+m4y*B402^4+
m3y*B402^3+m2y*B402^2+m1y*B402^1+mby,
Em.tipo="Em del líquido",PRONOSTICO(0402,
{INDICE(x.ascendente,COINCIDIR(0402,y.ascendente,1));
INDICE(x.descendente,COINCIDIR(0402,y.descendente,-1))},
{INDICE(y.ascendente,COINCIDIR(0402,y.ascendente,1));
INDICE(y.descendente,COINCIDIR(0402,y.descendente,-1))}),
Em.tipo="Sin valor (usar Em=1)",)
```

En la columna D la fórmula es:

```
=ifs(Em.tipo="Em del vapor",SI(B402<Ago.xq,Ago.m*B402+Ago.b,
En.m*B402+En.b),Em.tipo="Em del líquido",SI(0402<Ago.yq,
(0402-Ago.b)/Ago.m,(0402-En.b)/En.m),Em.tipo="Sin valor (usar Em=1)",)
```

Finalmente en la columna O la fórmula es:

```
=SI(Mostrar.Pseudoeq="Mostrar",ifs(Em.tipo="Em del vapor",
(C402-D402)*Em+D402,Em.tipo="Em del líquido",0401+$D$399,
Em.tipo="Sin valor (usar Em=1)",),)
```

Figura XIII.22: Datos para graficar el pseudoequilibrio

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q
387																	
388																	
389																	
390																	
391																	
392																	
393																	
394																	
395																	
396																	
397																	
398																	
399																	
400																	
401		0.046	0.30444	0.40580													0.201
402		0.079	0.40080	0.22127													0.329
403		0.111	0.45496	0.34335													0.410
404		0.144	0.49014	0.36317													0.439
405		0.177	0.51648	0.38298													0.463
406		0.209	0.53783	0.40279													0.484
407		0.242	0.55562	0.42261													0.502
408		0.275	0.57059	0.44242													0.519
409		0.307	0.58354	0.46223													0.535
410		0.340	0.59534	0.48205													0.550
411		0.373	0.60683	0.50186													0.565
412		0.406	0.61863	0.52168													0.580
413		0.438	0.63107	0.54149													0.595
414		0.471	0.64420	0.56130													0.611
415		0.504	0.65794	0.58112													0.627
416		0.536	0.67214	0.60093													0.644
417		0.569	0.68680	0.62074													0.660
418		0.602	0.70204	0.64056													0.677
419		0.635	0.71814	0.66037													0.695
420		0.667	0.73543	0.68019													0.713
421		0.700	0.75420	0.70000													0.733
422																	
423																	
424																	

## 5. Resolución de McCabe-Thiele

Esta es la página principal de la hoja de cálculo realizada. En esta página es en donde el usuario escoge el sistema a utilizar, ingresa los valores conocidos, puede ver el diagrama de equilibrio y los datos del sistema utilizados. Puede elegir el tipo de destilación, el tipo de alimentación y la temperatura de referencia. Puede ver también la especificación de cada una de las corrientes del sistema, el diagrama  $x$ - $y$  y la resolución del balance de energía.

Lo primero que realiza el usuario es la selección del sistema. En el rango B5:D5 se añade mediante validación de datos una lista desplegable de los sistemas disponibles tal y como se muestra en la Figura XIII.25. A la celda B5 en esta hoja de se denominó SISTEMA y a la celda E5, que contiene las opciones de presión a trabajar se le denominó **presion** (sin tilde) para utilizarse después llamando dicho nombre. En esta celda también se elige en una lista desplegable la presión a utilizar.

Se añaden tres celdas en donde el usuario podrá ingresar los valores de  $z_F$ ,  $x_D$  y  $x_W$ . Tal y como se muestra en la Figura XIII.23 el usuario puede elegir si los valores que está ingresando se encuentran en porcentaje másico o porcentaje mol.

Figura XIII.23: Lista desplegable para elegir las unidades de concentración

**Paso 2**  
 Ingrese los siguientes datos:

<b>zF</b>	20	% mol
<b>xD</b>	60	% mol

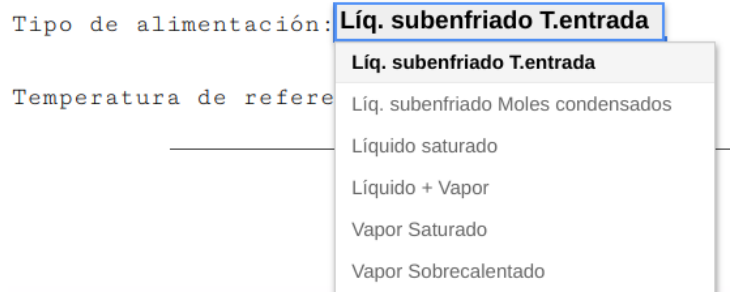
A las celdas C11, C13 y C15 se les denominó **zF.user**, **xD.user** y **xW.user** respectivamente para utilizarse posteriormente. También en la celda G11 se solicita que el usuario ingrese el flujo de alimentación ya sea en kmol/h o en kg/h y se le denominó **F.user**. En la celda G13 se solicita que el usuario ingrese la cantidad de energía, en kJ/h, perdida en el sistema. Si se asume que el proceso es adiabático y que no hay pérdidas de calor entonces se deja en blanco o se ingresa 0 kJ/h.

Se solicita luego que el usuario ingrese el tipo de destilación en la celda que se denominó **TipoDest**. Las opciones que aparecen en el listado desplegable dependen de el sistema utilizado ya que es posible utilizar vapor vivo únicamente si el compuesto menos volátil es Agua. Si este es el caso aparecen las opciones **Vapor vivo** y **Rehervidor**, de lo contrario solamente aparece **Rehervidor**. Esto se realiza mediante **Clic derecho>Validación de Datos>Lista a partir de un intervalo**. El intervalo utilizado es 'Resolución McCabe-Thiele' !F18:F19 ya que en estas dos celdas están las opciones, escritas en letras blancas para que sean invisibles para el usuario. En la celda F19 está la opción **Rehervidor** y en la celda F18 está la fórmula:

```
=SI(028="Agua","Vapor vivo"," ")
```

Seguidamente se solicita que el usuario elija el tipo de alimentación que va a utilizar en la celda denominada **Alimentacion**. Las opciones se muestran nuevamente en una lista desplegable:

Figura XIII.24: Lista desplegable para elegir el tipo de alimentación



Dependiendo de la elección del usuario la hoja de cálculo pide diferente información. Por ejemplo en la celda F21 se programa la cadena a devolver dependiendo del tipo de alimentación que se tenga:

```
=ifs(Alimentacion="Vapor sobrecalentado","T.entrada (K)",
Alimentacion="Vapor Saturado",,
Alimentacion="Líquido + Vapor","% de Vapor",
Alimentacion="Líquido Saturado",,
Alimentacion="Líqu. Subenfriado T.entrada","T.entrada (K)",
Alimentacion="Líqu. subenfriado Moles condensados","No. Moles")
```

Y en la celda H21 se amplía la solicitud de la información:

```
=ifs(Alimentacion="Vapor sobrecalentado","Ingrese la T a la que
entra la alimentación", Alimentacion="Vapor Saturado","",
Alimentacion="Líquido + Vapor","Ingrese el% de vapor en la
alimentación", Alimentacion="Líquido Saturado","",
Alimentacion="Líqu. Subenfriado T.entrada","Ingrese la T a la que
entra la alimentación",
Alimentacion="Líqu. subenfriado Moles condensados","Moles de
alimentación que condensan 1 mol de vapor")
```

En la celda D23 se elige la temperatura de referencia. Las opciones son: **TsatD**, **TsatW** y **Personalizado**. Si se elige la opción de personalizado el usuario debe ingresar la temperatura de referencia en Kelvin.

Se insertó luego el diagrama del sistema. Este diagrama dependerá de la elección del usuario ya que si se utiliza vapor vivo el diagrama debe incluir el ingreso de vapor y no incluye el rehervidor. Para esto se utilizó la función **=IMAGE()** en conjunto con la función **=SI()**. Se subieron ambos diagramas a internet y la hoja de cálculo elige entre la dirección de una imagen o la otra dependiendo del sistema. La fórmula en la celda A26 es la siguiente:

```
=IMAGE(SI(C19="Vapor vivo","https://drive.google.com/
uc?export=view&id=OB9F4dDy1HOR0VVNsUGhhVklwbEU",
"https://drive.google.com/uc?export=view&id=
OB9F4dDy1HOR0QVJ3bWJIaWJmRnc"),3)
```



Para facilitar los cálculos del método se importan todos los datos para el sistema utilizado tal y como se muestra en la Figura XIII.26.

En la celda S7 se importan los datos de equilibrio incluyendo títulos mediante la fórmula:

```
=DESREF('Líneas de Tendencia'!A9,0,0,22,5)
```

Se insertó un gráfico con la curva de equilibrio y la diagonal como guía. Se importa luego el nombre del primer componente en la celda O27:

```
=SI(SISTEMA="Usuario: Datos ingresados ",User.Comp1,  
BUSCARV(SISTEMA,Datos.sistemas,2))
```

Esta fórmula evalúa si el usuario está trabajando con un sistema personalizado. Si es así, llama al primer compuesto ingresado, si no, busca en la segunda columna del rango Datos.sistemas el nombre del primer compuesto. Para importar el segundo compuesto el procedimiento es similar:

```
=SI(SISTEMA="Usuario: Datos ingresados ",User.Comp2,  
BUSCARV(SISTEMA,Datos.sistemas,3))
```

La masa molar de los compuestos M.1 y M.2 se importa en las celdas P28 y P29 respectivamente mediante las fórmulas:

```
=SI(SISTEMA="Usuario: Datos ingresados ",User.M1,  
BUSCARV(O27,Datos.sistemas.2,3))
```

```
=SI(SISTEMA="Usuario: Datos ingresados ",User.M2,  
BUSCARV(O28,Datos.sistemas.2,3))
```

La temperatura de referencia se coloca en la celda V31 y se le nombra como T.ref. La importación se realiza mediante:

```
=IFS(D23="Tsat D",Tsat.D,D23="Tsat W",Tsat.W,D23="Personalizado",G23)
```

Se importan también las constantes para calcular las capacidades caloríficas. Para el compuesto 1 se denominaron cpC1.1, cpC1.2, cpC1.3 y así sucesivamente para cada una de las constantes. Las fórmulas utilizadas para su importación son:

```
=SI(SISTEMA="Usuario: Datos ingresados ",U1.C1,  
BUSCARV(O34,Datos.sistemas.2,4))  
=SI(SISTEMA="Usuario: Datos ingresados ",U1.C2,  
BUSCARV(O34,Datos.sistemas.2,5))  
=SI(SISTEMA="Usuario: Datos ingresados ",U1.C3,  
BUSCARV(O34,Datos.sistemas.2,6))  
=SI(SISTEMA="Usuario: Datos ingresados ",U1.C4,  
BUSCARV(O34,Datos.sistemas.2,7))  
=SI(SISTEMA="Usuario: Datos ingresados ",U1.C5,  
BUSCARV(O34,Datos.sistemas.2,8))
```

Para obtener las constantes del Compuesto 2 ( $cpC2.1$ ,  $cpC2.2$ , etc.) se utilizan fórmulas similares. Seguidamente se obtiene el valor de  $C_{pL}$  para cada uno de los compuestos. Por ejemplo para el compuesto 1 se calcula la capacidad calorífica en J/kmol K mediante:

```
=SI(ESBLANCO(T.ref),,cpC1.1+cpC1.2*T.ref+cpC1.3*T.ref^2+
cpC1.4*T.ref^3+cpC1.5*T.ref^4)
```

Se obtiene luego en la celda W34, la cual se nombró como  $C_{pL.1}$ , la capacidad calorífica en J/mol K simplemente mediante la conversión  $1 \text{ kmol} = 1000 \text{ mol}$  con la siguiente fórmula:

```
=V34/1000
```

Se realiza exactamente el mismo procedimiento para calcular el  $C_{pL}$  para el compuesto 2.

Se calcula luego el calor latente para cada uno de los compuestos a la temperatura de las corrientes de interés las cuales son  $F$ ,  $G_1$  y si se utiliza vapor vivo se calcula el calor latente para el agua en  $G$ . Primero se importan las constantes para el cálculo del calor latente. Para el compuesto 1 se utilizan las fórmulas:

```
=SI(SISTEMA="Usuario: Datos ingresados ",U1.L1,
BUSCARV(040,Datos.sistemas.2,9))
=SI(SISTEMA="Usuario: Datos ingresados ",U1.L2,
BUSCARV(040,Datos.sistemas.2,10))
=SI(SISTEMA="Usuario: Datos ingresados ",U1.L3,
BUSCARV(040,Datos.sistemas.2,11))
=SI(SISTEMA="Usuario: Datos ingresados ",U1.L4,
BUSCARV(040,Datos.sistemas.2,12))
=SI(SISTEMA="Usuario: Datos ingresados ",U1.LTc,
BUSCARV(040,Datos.sistemas.2,13))
```

Estas son las 4 constantes para el cálculo del calor latente del compuesto 1, y la última es la temperatura crítica. Luego para el cálculo de la temperatura reducida, en este caso del compuesto 1 a las condiciones de alimentación ( $F$ ), se tiene:

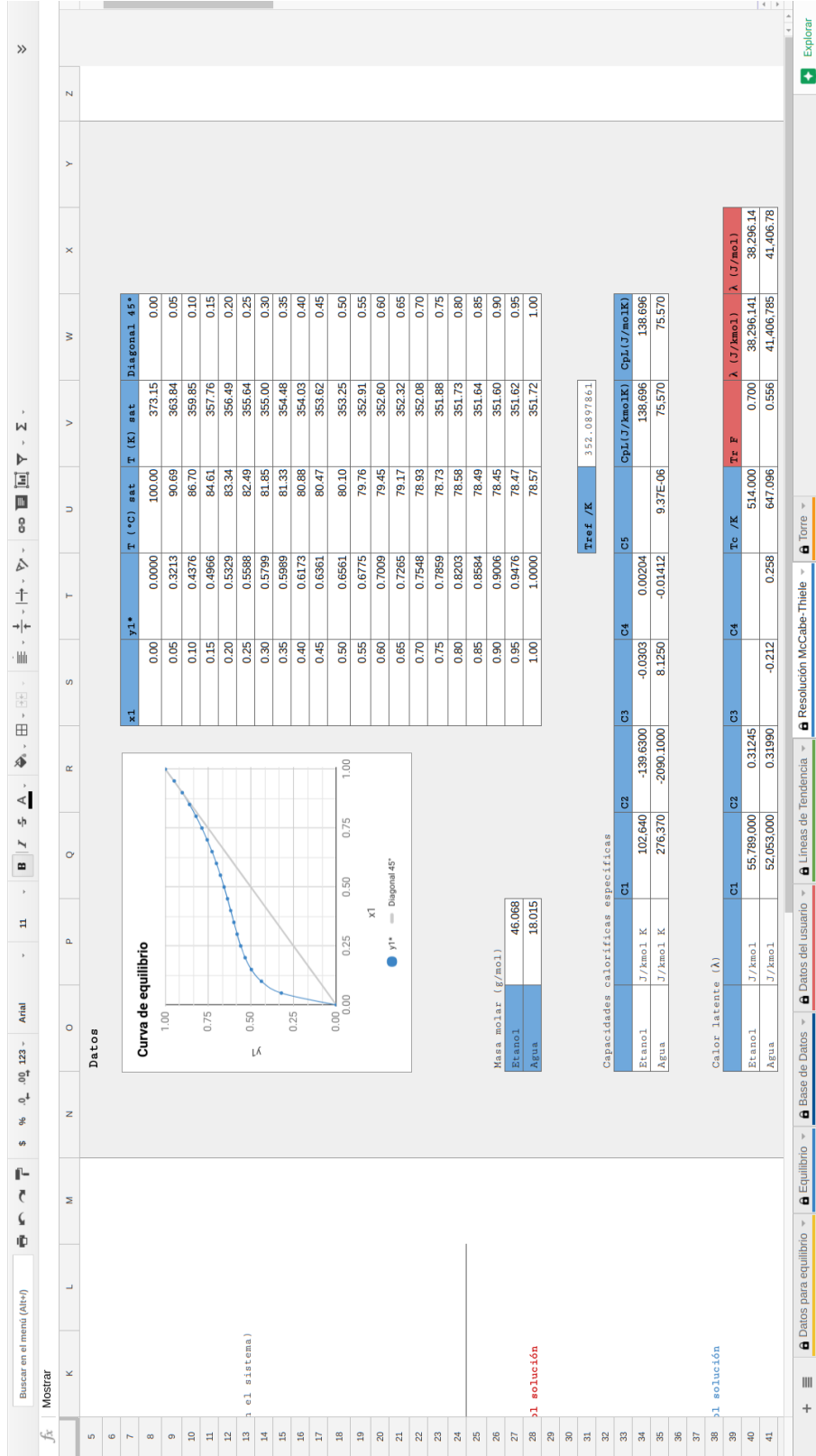
```
=Tsat.F/Tc.1
```

El calor latente se obtiene primero en J/kmol y posteriormente en J/mol mediante:

```
=Q40*(1-Tr.1)^(R40+S40*Tr.1+T40*Tr.1^2)
=W40/1000
```

Para el compuesto 2 a condiciones de  $F$  así como para las condiciones de las otras corrientes se realizan las mismas fórmulas con los cambios respectivos.

Figura XIII.26: Datos del equilibrio importados y cálculo de  $C_p$  y  $\lambda$



En la Figura XIII.27 se presenta el área de la hoja de cálculo en donde se calculan todas las especificaciones necesarias de las corrientes principales, en este caso para un sistema con rehervidor. En la Figura XIII.28 se presenta el caso en el que el usuario ha elegido un sistema con inyección de vapor vivo.

Se inicia calculando la concentración de la alimentación ( $z_F$ ) en *moles de soluto/moles de solución* como fracción, no en porcentaje. Si el usuario ha ingresado porcentaje molar entonces únicamente se divide dentro de 100, sin embargo si lo ha ingresado en porcentaje de masa, se relaciona con las masas molares mediante:

$$z_F = \frac{\frac{Z_F}{M_1}}{\frac{Z_F}{M_1} + \frac{(1-Z_F)}{M_2}}$$

En la celda I28, que se nombró como zF, se tiene la fórmula:

```
=SI(D11=" % mol",zF.user/100,((zF.user/100)/M.1)/((zF.user/100)/M.1+(1-(zF.user/100))/M.2))
```

La temperatura de saturación se obtiene utilizando el polinomio de la línea de tendencia  $T$  vs.  $x$  mediante:

```
=m10T*zF^10+m9T*zF^9+m8T*zF^8+m7T*zF^7+m6T*zF^6+m5T*zF^5+m4T*zF^4+m3T*zF^3+m2T*zF^2+m1T*zF+mbT
```

El calor latente de la solución ( $\lambda_{sol}$ ) toma en cuenta los calores latentes de ambos componentes de forma proporcional a su concentración en la mezcla. Por ello se obtiene en la celda I30 mediante:

```
=zF*CLat.F1+(1-zF)*CLat.F2
```

La capacidad calorífica de la solución de alimentación ( $C_{p,m,F}$ ) se obtiene en la celda I31 tomando en cuenta también las capacidades caloríficas de ambos compuestos:

```
=zF*CpL.1+(1-zF)*CpL.2
```

La entalpía de la alimentación como líquido saturado ( $H_{fL}$ ) y como vapor saturado ( $H_{fG}$ ) se obtienen en las celdas I32 e I34 respectivamente mediante las siguientes fórmulas:

$$H_{fL} = C_p \Delta T$$

$$H_{fG} = H_{fL} + \lambda$$

```
=I31*(Tsat.F-T.ref)
=I32+I30
```

La entalpía de la alimentación debe calcularse con base en su condición térmica ya que para cada una de las opciones térmicas se realiza una operación diferente. Estas condiciones se programaron en la celda que se denominó Hf mediante la fórmula:

```
=ifs(Alimentacion="Vapor sobrecalentado",I31*(G21-T.ref)+I30,
Alimentacion="Vapor Saturado",HfG,
Alimentacion="Líquido + Vapor",(G21/100)*HfG+((100-G21)/100)*HfL,
Alimentacion="Líquido Saturado",HfL,
Alimentacion="Líqu. Subenfriado T.entrada",I31*(G21-T.ref),
Alimentacion="Líqu. subenfriado Moles condensados",HfL-(I30/G21))
```

En esta fórmula la celda I31 contiene la  $C_{p,m,F}$ , la celda I30 contiene el  $\lambda_{sol}$  y la celda G21 contiene la información ingresada por el usuario. Las operaciones que realiza son:

1. Si es vapor sobrecalentado la celda G21 contiene la temperatura del vapor y obtiene la entalpía mediante  $C_p\Delta T + \lambda$ .
2. Si es vapor saturado entonces  $H_f = H_{fG}$ .
3. Si es mezcla líquido y vapor entonces la celda G21 contiene el porcentaje de vapor que hay en la mezcla alimentada. Primero se convierte ese porcentaje a fracción dividiendo dentro de 100 y luego obtiene  $H_f$  sumando  $H_{fG}$  y  $H_{fL}$  en proporción a la fracción del vapor y del líquido en la mezcla.
4. Si es un líquido saturado entonces  $H_f = H_{fL}$ .
5. Si es un líquido subenfriado que se conoce su temperatura de entrada entonces la celda G21 contiene la temperatura del líquido y obtiene la entalpía mediante  $C_p\Delta T$ .
6. Si es un líquido subenfriado y se conoce que al ingresar provoca que  $n$  de moles de alimentación (indicados en la celda G21) condensen 1 mol de vapor entonces  $H_f = H_{fL} - (\lambda/n)$ .

Las especificaciones de la corriente de Residuos ( $W$ ), de destilado ( $D$ ) y del vapor de salida de la torre ( $G_1$ ) se obtiene mediante los mismos principios con fórmulas similares.

Para calcular la corriente de vapor de entrada se siguen los mismos principios solamente las fórmulas se modifican un poco ya que deben de realizarse los cálculos y aparecer los resultados en la hoja de cálculo únicamente cuando el usuario indica que se trabajará con Vapor vivo. En las celdas desde la H58 hasta las celdas H63 aparecen todos los títulos de las características de la corriente de vapor. Sin embargo como estos títulos deben de aparecer únicamente si se está trabajando con vapor vivo entonces se utilizan fórmulas como la siguiente:

```
=SI(TipoDest="Vapor vivo","Vapor","")
```

Para los cálculos se escribe la condición de manera parecida ya que deben de realizarse únicamente si se está trabajando con vapor vivo. En las celdas de la I59 a la I63 se obtienen respectivamente  $y_G$ ,  $T_{satG}$ ,  $C_{pG}$ ,  $\lambda_{vapor}$  y  $H_G$  mediante:

```
=SI(TipoDest="Vapor vivo",0,"")
=SI(TipoDest="Vapor vivo",CONVERTIR((AntoineAguaB/
(AntoineAguaA-LOG10(CONVERTIR(presion,"atm","Torr"))))-AntoineAguaC,
"C","K"),"")
=SI(TipoDest="Vapor vivo",CpL.2," ")
=SI(TipoDest="Vapor vivo",CLat.Gvapor2," ")
=SI(TipoDest="Vapor vivo",I61*(Tsat.G-T.ref)+I62," ")
```

Figura XIII.27: Especificaciones de las corrientes en el sistema usando rehveridor

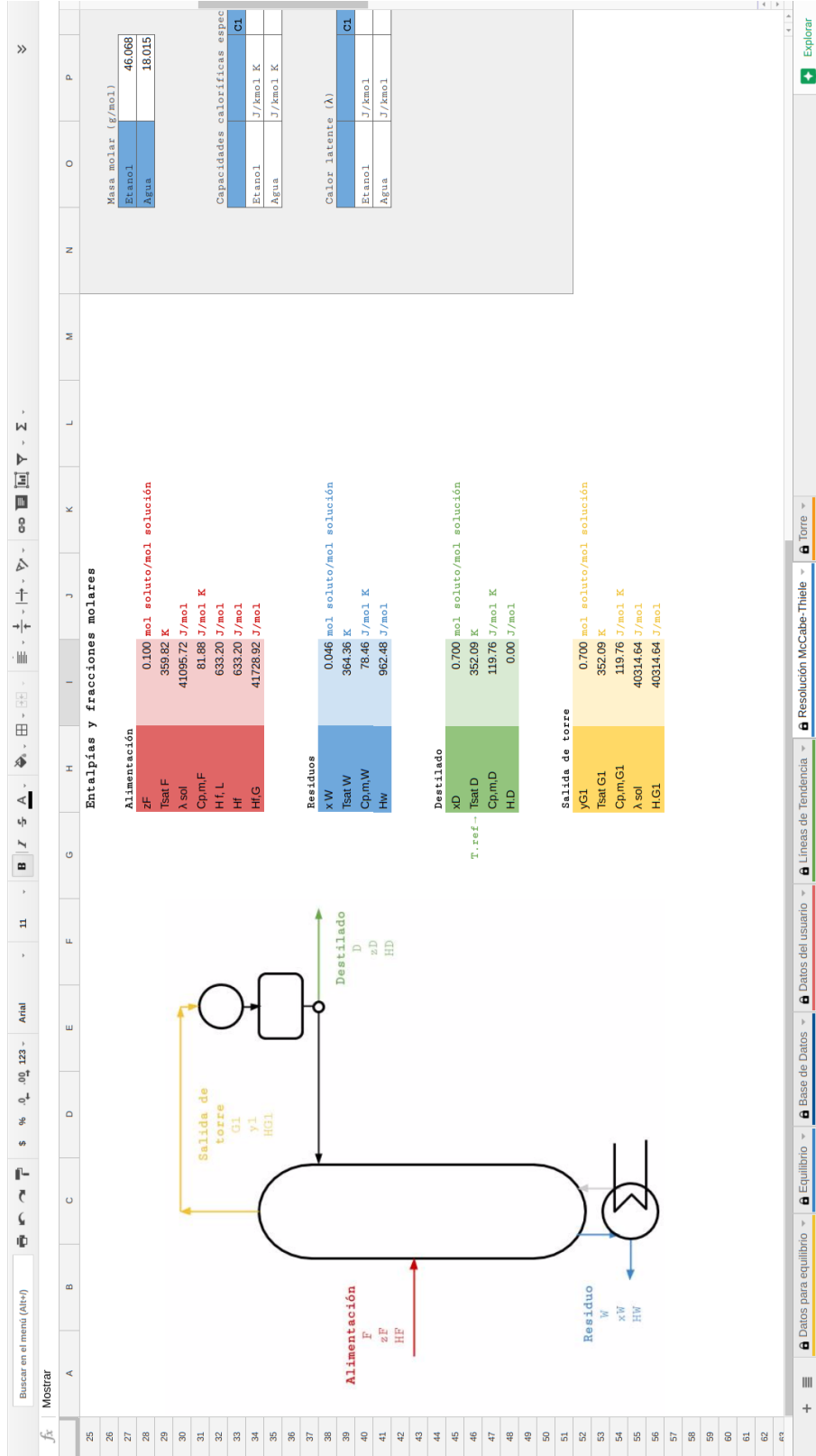
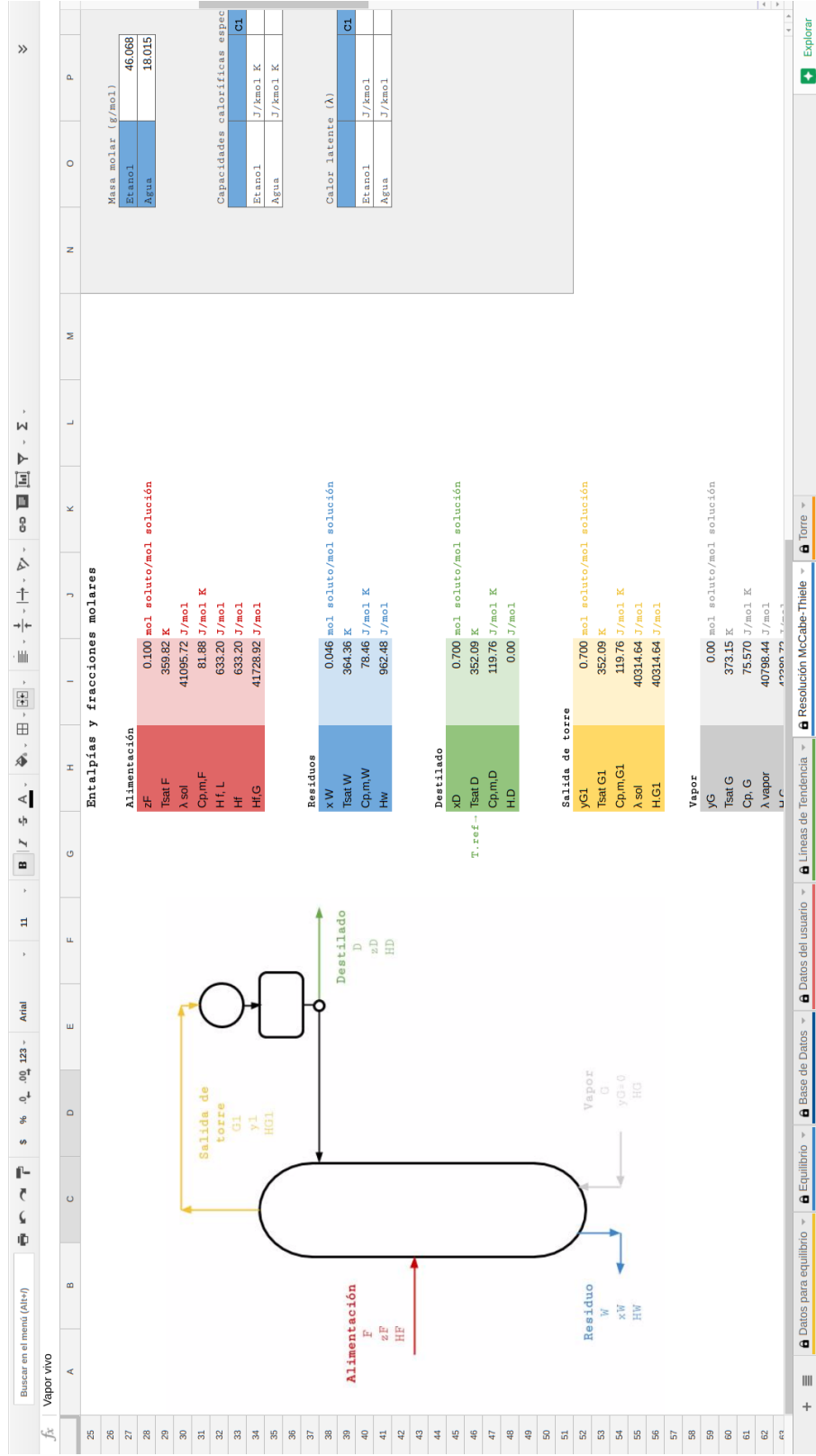


Figura XIII.28: Especificaciones de las corrientes en el sistema usando vapor vivo



Seguidamente se calcula el valor  $q$  para iniciar la gráfica de McCabe-Thiele, el valor  $q$  se obtiene según las entalpías de la alimentación tal y como se detalla en el Marco Teórico. Se utiliza la siguiente fórmula en la celda C68:

```
=SI(ESBLANCO(T.ref),,(HfG-Hf)/(HfG-HfL))
```

La pendiente y el intercepto de a línea  $q$  se obtienen respectivamente utilizando las siguientes fórmulas:

```
=SI(ESBLANCO(T.ref),,SI(Alimentacion="Líquido saturado","Infinito",
q/(q-1)))
=SI(ESBLANCO(T.ref),,SI(Alimentacion="Líquido saturado","No aplica",
-zF/(q-1)))
```

Como se aprecia en la Figura XIII.31 se ha insertado una gráfica en la que aparecerán todas las líneas del método. Esta gráfica se inserta en la opción **Insertar gráfico**. En la pestaña **Tipos de gráficos** se ingresaron los rangos a graficar, se marca la casilla **Usar la fila 137 como encabezado** y la casilla **Usar la columna B como etiqueta** y se eligió el gráfico de línea (no redondeada). Los rangos ingresados son los siguientes:

```
'Líneas de Tendencia'!B137:B441, 'Líneas de Tendencia'!A137:A402,
'Líneas de Tendencia'!E137:E402, 'Líneas de Tendencia'!F137:F402,
'Líneas de Tendencia'!G137:G402, 'Líneas de Tendencia'!H137:H402,
'Líneas de Tendencia'!I137:I402, 'Líneas de Tendencia'!J137:J402,
'Líneas de Tendencia'!K137:K402, 'Líneas de Tendencia'!L137:L402,
'Líneas de Tendencia'!M137:M402, 'Líneas de Tendencia'!N137:N402,
'Líneas de Tendencia'!O137:O441
```

Se utilizan esos rangos ya que aquí están los valores de cada una de las líneas a graficar. El contenido de cada columna se explica a continuación:

- En la columna B aparecen los valores de  $x$ .
- En la columna A están los valores de  $y$ .
- En la columna E están los valores de la Diagonal de  $45^\circ$ .
- En la columna F están los valores de la línea  $q$ .
- En la columna G están los valores de  $x_D$ .
- En la columna H están los valores de  $x_W$ .
- En la columna I están los valores de  $x_F$ .
- En la columna J están los valores de la línea de Enriquecimiento para  $R_m$ .
- En la columna K están los valores de la línea de Enriquecimiento para  $R$ .
- En la columna L están los valores de la línea de Agotamiento.
- En la columna M están los valores para la escalera de etapas mínimas.
- En la columna N están los valores para la escalera de etapas reales.
- En la columna O están los valores para la curva de pseudoequilibrio.

De acuerdo con el método, el valor de  $R_m$  se obtiene de forma diferente si hay tangencia en el enriquecimiento. Por ello el simulador solicita que el usuario elija una de las siguientes opciones:

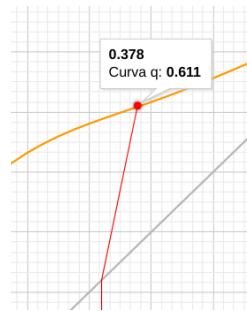
1. Tangencia en el enriquecimiento
2. Sin tangencia

Esto se realizó insertando una lista desplegable mediante la opción validación de datos. Dependiendo de la opción elegida entre las dos anteriores en la celda E70 aparece un mensaje gracias a la fórmula:

```
=ifs(Tangencia="Tangencia en el enriquecimiento",
    "Ingrese el valor de x en el que la curva es tangente:",
    Tangencia="Sin tangencia", "Ingrese el valor de x
    en el que la curva q intercepta la curva de equilibrio:")
```

A la celda F71 se le asigna el nombre `q.equilibrio.tan` ya que en esta celda el usuario ingresará el valor en que la línea  $q$  toca el equilibrio en caso de que no haya tangencia o ingresa el valor en el que hay tangencia de existir esta. El usuario podrá ayudarse a determinar el valor dando clic en el gráfico y colocando el cursor sobre la línea de equilibrio, aparecerá un punto con los valores  $x$  y  $y$  de este tal y como se muestra en la Figura XIII.29.

Figura XIII.29: Interacción con el gráfico de la hoja de cálculo



Cuando ya se tiene este valor la hoja *Líneas de Tendencia* obtiene la pendiente y el intercepto de la línea de operación de enriquecimiento tal y como se explicó anteriormente. Esta línea de operación aparece por tanto en la gráfica como se muestra en la Figura XIII.30.

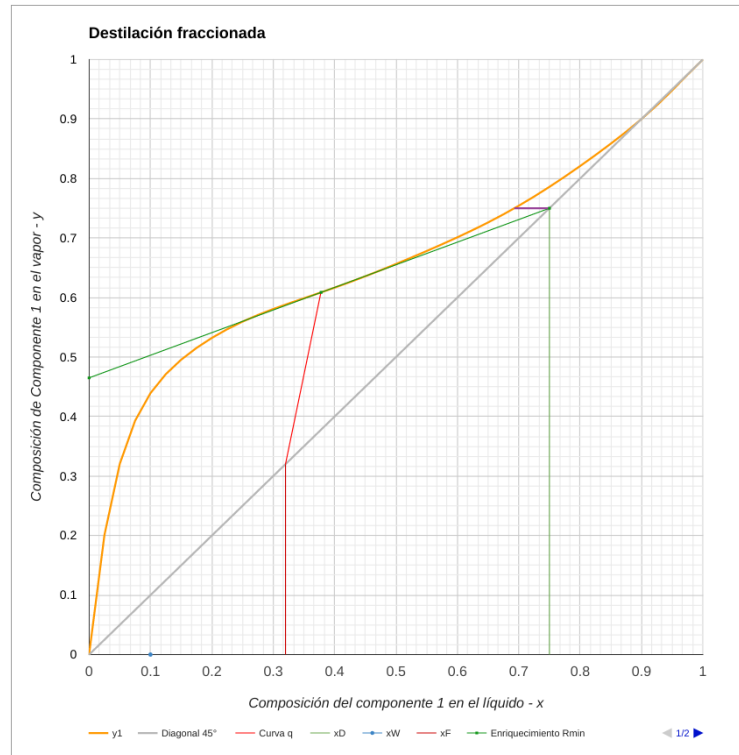
El valor de  $R_m$  se obtiene en la celda C74 con la fórmula:

```
=SI(ESBLANCO(F71), "", (xD/EnRm.b)-1)
```

Luego se creó una lista desplegable para que el usuario elija con qué relación de reflujo va a trabajar. Las opciones son:

- No. de veces  $R_{min}$
- Relación de reflujo específica

Luego el usuario debe ingresar su el valor deseado en la celda I79. Al igual que en el caso de la tangencia el mensaje para solicitar la relación de reflujo depende de la elección del usuario. La hoja de cálculo muestra luego la relación de reflujo en la celda J81 la cual se nombró como `RelRef1`. Si el usuario ha elegido una  $R$  que sea un número de veces  $R_{min}$  entonces realiza la multiplicación, pero si ha elegido ingresar una  $R$  específica entonces deja el valor ingresado por el usuario tal y como se muestra en la fórmula:

Figura XIII.30: Línea de operación de enriquecimiento para  $R_m$ 

```
=SI(I76="No. de veces Rmin", I79*Rmin,I79)
```

El valor de  $y$  que se convierte en el intercepto de la nueva línea de enriquecimiento se calcula mediante:

```
=SI(ESBLANCO(I79), ,xD/(RelRef1+1))
```

Automáticamente al ingresar el valor de la relación de reflujo la hoja *Líneas de tendencia* hace los cálculos necesarios y aparece en la gráfica la nueva línea de enriquecimiento.

Otro aspecto importante que se puede realizar mediante el método gráfico de McCabe-Thiele cuando se realiza a mano es determinar el número de etapas mínimas que se requerirían para realizar la separación si se utilizara una relación de reflujo infinita. Por tanto se le da la opción al usuario de Mostrar u Ocultar el número de etapas mínimas. La gráfica mostrando el número de etapas mínimas se ve tal y como se muestra en la Figura XIII.31. Si el usuario elige mostrarlas aparece el título  $N_m$  y el número de etapas en las celdas J86 y K86 utilizando las siguientes fórmulas:

```
=SI(Mostrar.Nm="Mostrar", "Nm", "")
=SI(Mostrar.Nm="Mostrar", Nm, "")
```

En la segunda fórmula se llama a la celda  $N_m$  la cual se encuentra en la hoja *Líneas de tendencia* y contiene el número de etapas mínimas.

Luego se le da la opción al usuario de ocultar la línea de enriquecimiento para  $R_m$  ya que tener dos líneas de enriquecimiento y el gráfico de escalera sobre la misma gráfica puede ser mucho contenido visual. Por tanto se añade otra lista desplegable con las opciones. Dependiendo de la opción

elegida por el usuario las fórmulas en la hoja *Líneas de tendencia* devuelven o no valores. En caso de que las celdas queden vacías la gráfica desaparece.

Se le solicita luego al usuario que elija el tipo de eficiencia a utilizar o elija que no la usará. La lista desplegable que se creó contiene las opciones:

- Em del líquido
- Em del vapor
- Sin valor (usar Em=1)

Dependiendo de la opción elegida de la lista anterior en las celdas I93 y K93 aparece un mensaje diferente solicitando la eficiencia o no aparece mensaje en lo absoluto. Esto se realiza mediante las siguientes fórmulas respectivamente:

```
=ifs(Em.tipo="Em del líquido","EmL",Em.tipo="Em del vapor","EmV",
Em.tipo="Sin valor (usar Em=1)","")
=ifs(Em.tipo="Em del líquido","Ingrese EmL",
Em.tipo="Em del vapor","Ingrese EmV",
Em.tipo="Sin valor (usar Em=1)","")
```

Dependiendo del número que el usuario ingrese en la celda J93 la cual se nombró como **Em.user** la hoja *Líneas de tendencia* obtiene los datos para la gráfica escalonada, calcula el número de etapas **Np** y la etapa de alimentación **Etapa.Alim**. Dichos valores solamente se llaman hacia esta hoja principal para informarlos al usuario.

Por último se le da la opción al usuario de mostrar la curva de pseudoequilibrio utilizando nuevamente una lista desplegable. De acuerdo a la opción elegida por el usuario las fórmulas en la hoja **Líneas de tendencia** devuelven o no los valores del pseudoequilibrio y si las celdas están vacías no aparece ninguna línea de pseudoequilibrio en la gráfica.

Figura XIII.31: Opciones finales para la resolución del sistema y gráfica de la operación

Buscar en el menú (Alt+F)

66 67 68 69 70 71 72 73 74 75 76 77 78 79 80 81 82 83 84 85 86 87 88 89 90 91 92 93 94 95 96 97 98 99 100 101 102 103

**Paso 4**  
Elija si entre la curva de enriquecimiento y de equilibrio habrá tangencia o no:

**Sin Tangencia**

Curva Q:   
 Valor q:   
 Pendiente q:   
 Intercepto q:

Ingrese el valor de x en el que la curva q intercepta la curva de equilibrio:  
 x:

Nota: Puede ingresar un valor de x lo modificando hasta que la curva q (se muestra abajo) alcance el equilibrio.

R. min:

Relación de reflujo

No. de veces Rmin:  Abajo

Ingrese la relación de reflujo (No. veces Rmin)

R:   
 y=xD/(R+1):

¿Desea mostrar el número de etapas mínimas?  
**Mostrar**  Abajo

¿Desea ocultar la línea de enriquecimiento en Rmin?  
**Ocultar**

En del liquido:  **Ingreso Enl**

No. de etapas Reales:  **Ng**

Etapas de alimentación:  **Etapas No.**

¿Desea mostrar la curva de pseudoequilibrio?  
**No Mostrar**

**Destilación fraccionada**

Legend:  
 y1: Diagonal 45°  
 xW: Línea q  
 xD: Enriquecimiento Rmin  
 xF: Enriquecimiento  
 Etapas min.: Etapas reales

Datos para equilibrio  Equilibrio  Base de Datos  Datos del usuario  Líneas de Tendencia  Resolución McCabe-Thiele  Torre  Explorar

Por último se le presenta al usuario el balance de masa y energía. Ya para este punto en la hoja de cálculo el usuario ya ha ingresado todos los valores necesarios para realizarlo. Lo primero que se realizó para poder colocar el balance en las unidades correctas fue convertir el flujo de alimentación ingresado por el usuario ( $F_{\text{user}}$ ) en mol/h para que el sistema fuera consistente. Esto se realizó en la celda C118 la cual se nombró como  $F$ , la fórmula es la siguiente:

```
=SI(H11="kg/h", (CONVERTIR(F.user, "kg", "g"))/(zF*M.1+(1-zF)*M.2) ,
F.user*1000)
```

Para el calor perdido  $Q_t$  si el usuario no ingresó nada su valor debe ser 0 y si el usuario ingresó un valor lo convierte a J/h. A la celda C119 se le dió el nombre de  $Q_t$  y la fórmula es:

```
=SI(ESBLANCO(Qt.user), 0, Qt.user*1000)
```

Posteriormente se realiza el balance del sistema. Una forma sencilla de realizarlo es mediante matrices. Como se planteó en el Marco Teórico, se tienen las siguientes ecuaciones cuando se opera utilizando rehervidor:

$$\begin{aligned} F &= D + W \\ z_F F &= x_D D + x_W W \\ FH_F + Q_b &= DH_D + WH_W + Q_C + Q_T \\ Q_C &= D(R + 1)(H_{G1} - H_D) \end{aligned}$$

Se tienen por tanto 4 ecuaciones y 4 incógnitas las cuales son  $D$ ,  $W$ ,  $Q_C$  y  $Q_b$ .

En el caso de utilizar vapor vivo, no hay un calor de rehervidor pero hay una corriente más ( $G$ ) por tanto las ecuaciones son:

$$\begin{aligned} F + G &= D + W \\ z_F F + y_G G &= x_D D + x_W W \\ FH_F + GH_G &= DH_D + WH_W + Q_C + Q_T \\ Q_C &= D(R + 1)(H_{G1} - H_D) \end{aligned}$$

De igual manera se tienen 4 ecuaciones y 4 incógnitas. En este caso las incógnitas son  $D$ ,  $W$ ,  $G$  y  $Q_C$ .

Se sabe que un sistema de ecuaciones puede expresarse como una multiplicación de matrices de la forma:

$$Ax = B$$

En donde  $A$  es la matriz de coeficientes  $x$  es la matriz de incógnitas y  $B$  es la matriz de constantes resultantes. El sistema puede resolverse multiplicando la matriz  $B$  por la matriz inversa de  $A$  de la forma:

$$x = A^{-1}B$$

Por tanto ordenando las ecuaciones de manera que las constantes queden del lado derecho tenemos, si se utiliza rehervidor:

$$\begin{array}{rcccccc} D & + & W & & = & F \\ x_D D & + & x_W W & & = & z_F F \\ D(R + 1)(H_{G1} - H_D) & & & - & Q_C & = & 0 \\ DH_D & + & WH_W & + & Q_C & - & Q_b = FH_F - Q_t \end{array}$$

Y si utilizamos vapor vivo:

$$\begin{array}{rclcl}
 D & + & W & - & G & = & F \\
 x_D D & + & x_W W & - & y_G G & = & z_F F \\
 D(R+1)(H_{G1} - H_D) & & & - & Q_C & = & 0 \\
 DH_D & + & WH_W & + & Q_C & - & GH_G & = & FH_F - Q_t
 \end{array}$$

Al colocar estos sistemas en matrices para los sistemas que estamos trabajando obtenemos las siguientes multiplicaciones de matrices:

$$[A] \times [x] = [B]$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ x_D & x_W & 0 & 0 \\ (R+1)(H_{G1} - H_D) & 0 & -1 & 0 \\ H_D & H_W & 1 & -1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} D \\ W \\ Q_C \\ Q_B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F \\ z_F F \\ 0 \\ FH_F - Q_t \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & -1 \\ x_D & x_W & 0 & -y_G \\ (R+1)(H_{G1} - H_D) & 0 & -1 & 0 \\ H_D & H_W & 1 & -H_G \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} D \\ W \\ Q_C \\ G \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F \\ z_F F \\ 0 \\ FH_F - Q_t \end{bmatrix}$$

Como se pueda apreciar, la resolución es casi la misma para ambos sistemas (rehervidor y vapor vivo) solamente varía la última columna que corresponde a la última variable. Ambas son matrices  $4 \times 4$  por lo que ambas pueden ser resueltas en las mismas celdas. En la Figura XIII.32 se muestra en el rango B124:E127 la matriz A, en el rango B123:E123 se encuentran los nombres de las variables de cada columna. Las fórmulas de la columna B a la E son las siguientes:

D	W	Qc	=SI(TipoDest="Vapor vivo","G","Qb")
=1	=1	=0	=SI(TipoDest="Vapor vivo",-1,0)
=xD	=xW	=0	=SI(TipoDest="Vapor vivo",-yG,0)
=(RelRefl+1)* (H.G1-H.D)	=0	=-1	=SI(TipoDest="Vapor vivo",0,0)
=H.D	=H.W	=1	=SI(TipoDest="Vapor vivo",-H.G,-1)

Luego en el rango F124:F127 se tienen las siguientes fórmulas de la matriz B:

```

=F
=zF*F
=0
=F*Hf-Qt

```

Se debe obtener ahora la matriz inversa de los coeficientes ( $A^{-1}$ ). Esto se realiza en la celda B132 mediante la fórmula:

```
=MINVERSA(B124:E127)
```

Y los resultados de cada una de las variables se obtienen en la celda F132 utilizando la fórmula:

```
=MMULT(B132:E135,F124:F127)
```

En la sección de resultados se llama, en la celda J122, el resultado del flujo  $D$  en mol/h y se convierte a kg/h, en la celda J123 mediante las fórmulas:

```
=F132
=CONVERTIR(J122*(xD*M.1+(1-xD)*M.2),"g","kg")
```

Para el flujo de  $W$  las fórmulas son:

```
=F133
=CONVERTIR(J125*(xW*M.1+(1-xW)*M.2),"g","kg")
```

Para el flujo de energía  $Q_C$  se llama el valor en J/h y luego se convierte a kJ/h utilizando las fórmulas:

```
=F134
=J128/1000
```

Luego se llama y se convierte la última variable, pero como esta depende del sistema, debe utilizarse una condición. El título en la celda I131 cambia de acuerdo a la siguiente fórmula:

```
=SI(TipoDest="Vapor vivo","G","Qb")
```

Y en el rango J131:K132 se tienen las fórmulas:

```
=F135
=SI(TipoDest="Vapor vivo",
"mol/h","J/h")
=SI(TipoDest="Vapor vivo",
"kg/h","kJ/h")
=SI(TipoDest="Vapor vivo",
CONVERTIR(J125*(yG*M.1+(1-yG)*M.2),
"g","kg"),J131/1000)
```

En el caso de utilizarse vapor vivo, otro resultado que se brinda es  $x_{\Delta W}$ . Este es el punto en el que la curva de agotamiento cruza la diagonal de  $45^\circ$  y está dado por la ecuación:

$$x_{\Delta W} = \frac{W x_W}{W - G}$$

En la celda J134 aparece el valor gracias a la fórmula:

```
=SI(TipoDest="Vapor vivo",J125*xW/(J125-J131),)
```

Se obtienen también los flujos de líquido y vapor para la sección de enriquecimiento ( $L$  y  $G$ ) conociendo que la línea de operación está dada por:

$$y = \frac{L}{G}x + \frac{D}{G}x_D$$

En el simulador la línea de operación se obtuvo en función de la pendiente y el intercepto, es decir como:

$$y = \text{En.m} * x + \text{En.b}$$

Por tanto  $L$  está dado por:

$$\frac{L}{G} = \text{En.m} \Rightarrow L = G * \text{En.m}$$

Y  $G$  se obtiene mediante:

$$\frac{D}{G}x_D = \text{En.b} \Rightarrow G = \frac{D}{\text{En.b}}x_D$$

En el caso de la sección de agotamiento la línea de operación, en la teoría y en el simulador, está dado por estas ecuaciones:

$$y = \frac{\bar{L}}{\bar{G}}x - \frac{W}{\bar{G}}x_W$$

$$y = \text{Ago.m} * x + \text{Ago.b}$$

Por tanto  $\bar{G}$  está dado por:

$$-\frac{W}{\bar{G}}x_W = \text{Ago.b} \Rightarrow \bar{G} = -\frac{W}{\text{Ago.b}}x_W$$

Luego  $\bar{L}$  está dado por:

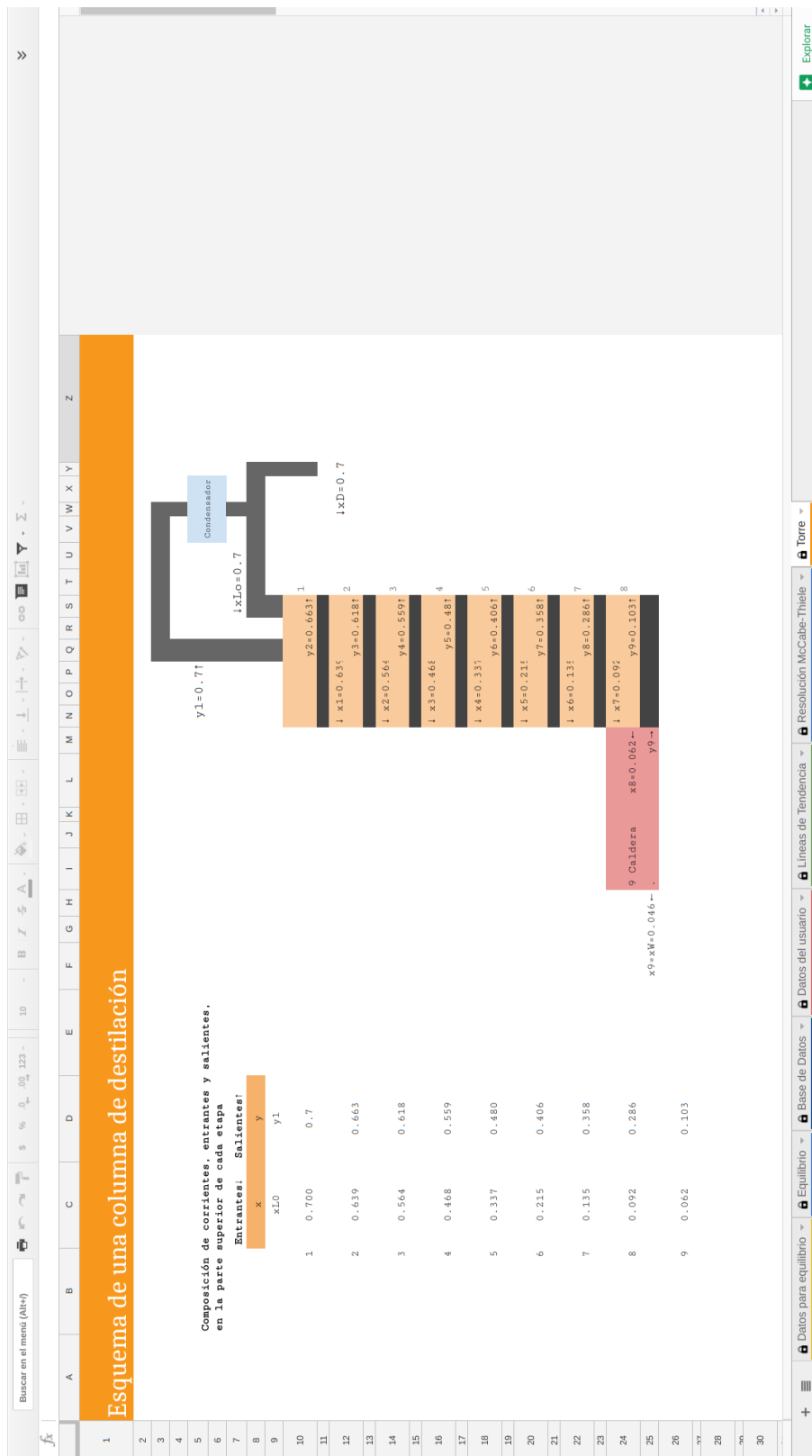
$$\frac{\bar{L}}{\bar{G}} = \text{Ago.m} \Rightarrow \bar{L} = \bar{G} * \text{Ago.m}$$

Por último se presenta una pestaña en la que se diagrama una torre con la cantidad de etapas requeridas y se presentan los flujos con sus respectivas concentraciones. Se muestra una captura de la pestaña en la Figura XIII.33.

Figura XIII.32: Resultados del balance de masa, materia y energía



Figura XIII.33: Diagrama de una columna de destilación con las concentraciones de las corrientes respectivas



## 6. Rangos con nombre en la hoja de cálculo

A continuación se presentan los rangos a los cuales se les asignó un nombre para facilitar la elaboración y la comprensión de las fórmulas en la hoja de cálculo.

Cuadro XIII.2: Rangos con nombre asignado en la hoja de cálculo

Nombre	Rango en la hoja de cálculo	Descripción
A.1	Equilibrio!C12	Constante de Antoine compuesto 1
A.12	Equilibrio!B17	Parámetro de Van Laar
A.2	Equilibrio!C13	Constante de Antoine compuesto 2
A.21	Equilibrio!B18	Parámetro de Van Laar
Ago.b	Líneas de Tendencia!C200	Intercepto curva de agotamiento
Ago.m	Líneas de Tendencia!D200	Pendiente curva de agotamiento
Ago.xq	Líneas de Tendencia!B199	$x$ inicial para curva de agotamiento
Ago.yq	Líneas de Tendencia!L199	$y$ inicial para curva de agotamiento
Alimentacion	Resolución McCabe-Thiele!C21	Condición de alimentación
AntoineAguaA	Datos para equilibrio!I5	Constante de Antoine del agua
AntoineAguaB	Datos para equilibrio!J5	Constante de Antoine del agua
AntoineAguaC	Datos para equilibrio!K5	Constante de Antoine del agua
B.1	Equilibrio!D12	Constante de Antoine compuesto 1
B.2	Equilibrio!D13	Constante de Antoine compuesto 2
C.1	Equilibrio!E12	Constante de Antoine compuesto 1
C.2	Equilibrio!E13	Constante de Antoine compuesto 2
CLat.F1	Resolución McCabe-Thiele!X40	C. latente a condiciones de F compuesto 1
CLat.F2	Resolución McCabe-Thiele!X41	C. latente a condiciones de F compuesto 2
CLat.G1.1	Resolución McCabe-Thiele!X44	C. latente a condiciones de G1 compuesto 1
CLat.G1.2	Resolución McCabe-Thiele!X45	C. latente a condiciones de G1 compuesto 2
CLat.Gvapor1	Resolución McCabe-Thiele!X48	C. latente a condiciones de G compuesto 1
CLat.Gvapor2	Resolución McCabe-Thiele!X49	C. latente a condiciones de G compuesto 2
cpC1.1	Resolución McCabe-Thiele!Q34	Constantes para $C_p$
cpC1.2	Resolución McCabe-Thiele!R34	Constantes para $C_p$
cpC1.3	Resolución McCabe-Thiele!S34	Constantes para $C_p$
cpC1.4	Resolución McCabe-Thiele!T34	Constantes para $C_p$
cpC1.5	Resolución McCabe-Thiele!U34	Constantes para $C_p$
cpC2.1	Resolución McCabe-Thiele!Q35	Constantes para $C_p$
cpC2.2	Resolución McCabe-Thiele!R35	Constantes para $C_p$
cpC2.3	Resolución McCabe-Thiele!S35	Constantes para $C_p$
cpC2.4	Resolución McCabe-Thiele!T35	Constantes para $C_p$
cpC2.5	Resolución McCabe-Thiele!U35	Constantes para $C_p$
CpL.1	Resolución McCabe-Thiele!W34	$C_p$ compuesto 1
CpL.2	Resolución McCabe-Thiele!W35	$C_p$ compuesto 2
Datos.sistemas	Datos para equilibrio!A5:K23	Datos para cálculo del equilibrio
Datos.sistemas.2	Datos para equilibrio!A32:M47	Datos para cálculo de $C_p$ y $\lambda$
Em	Líneas de Tendencia!D301	Eficiencia de Murphree
Em.tipo	Resolución McCabe-Thiele!I92	Tipo de eficiencia
Em.user	Resolución McCabe-Thiele!J93	Valor de la eficiencia ingresado
En.b	Líneas de Tendencia!C197	Intercepto curva de enriquecimiento
En.m	Líneas de Tendencia!D197	Pendiente curva de enriquecimiento
EnRm.b	Líneas de Tendencia!C194	Intercepto curva de en. para $R_m$
EnRm.m	Líneas de Tendencia!D194	Pendiente curva de en. para $R_m$
EnRmOcultar	Resolución McCabe-Thiele!I89	Ocultar/mostrar la línea de en. para $R_m$

Cuadro XIII.3: Rangos con nombre asignado en la hoja de cálculo (continuación)

Nombre	Rango en la hoja de cálculo	Descripción
Etapa.Alim	Líneas de Tendencia!P300	Número de etapa en la que se alimenta
F	Resolución McCabe-Thiele!C118	Flujo de alimentación en mol/h
F.user	Resolución McCabe-Thiele!G11	$F$ indicado por el usuario
H.D	Resolución McCabe-Thiele!I48	Entalpía del destilado
H.G	Resolución McCabe-Thiele!I63	Entalpía del vapor vivo, $G$
H.G1	Resolución McCabe-Thiele!I56	Entalpía del vapor saliente de la torre
H.W	Resolución McCabe-Thiele!I41	Entalpía del residuo
Hf	Resolución McCabe-Thiele!I33	Entalpía de la alimentación
HfG	Resolución McCabe-Thiele!I34	Entalpía de $F$ como gas saturado
HfL	Resolución McCabe-Thiele!I32	Entalpía de $F$ como líquido saturado
M.1	Resolución McCabe-Thiele!P27	Masa molar, compuesto 1
M.2	Resolución McCabe-Thiele!P28	Masa molar, compuesto 2
m10T	Líneas de Tendencia!B68	Coefficiente de eq. polinómica de $T$
m10y	Líneas de Tendencia!B115	Coefficiente de eq. polinómica de $y$
m1T	Líneas de Tendencia!K68	Coefficiente de eq. polinómica de $T$
m1y	Líneas de Tendencia!K115	Coefficiente de eq. polinómica de $y$
m2T	Líneas de Tendencia!J68	Coefficiente de eq. polinómica de $T$
m2y	Líneas de Tendencia!J115	Coefficiente de eq. polinómica de $y$
m3T	Líneas de Tendencia!I68	Coefficiente de eq. polinómica de $T$
m3y	Líneas de Tendencia!I115	Coefficiente de eq. polinómica de $y$
m4T	Líneas de Tendencia!H68	Coefficiente de eq. polinómica de $T$
m4y	Líneas de Tendencia!H115	Coefficiente de eq. polinómica de $y$
m5T	Líneas de Tendencia!G68	Coefficiente de eq. polinómica de $T$
m5y	Líneas de Tendencia!G115	Coefficiente de eq. polinómica de $y$
m6T	Líneas de Tendencia!F68	Coefficiente de eq. polinómica de $T$
m6y	Líneas de Tendencia!F115	Coefficiente de eq. polinómica de $y$
m7T	Líneas de Tendencia!E68	Coefficiente de eq. polinómica de $T$
m7y	Líneas de Tendencia!E115	Coefficiente de eq. polinómica de $y$
m8T	Líneas de Tendencia!D68	Coefficiente de eq. polinómica de $T$
m8y	Líneas de Tendencia!D115	Coefficiente de eq. polinómica de $y$
m9T	Líneas de Tendencia!C68	Coefficiente de eq. polinómica de $T$
m9y	Líneas de Tendencia!C115	Coefficiente de eq. polinómica de $y$
mbT	Líneas de Tendencia!L68	Coefficiente de eq. polinómica de $T$
mby	Líneas de Tendencia!L115	Coefficiente de eq. polinómica de $y$
Mostrar.Nm	Resolución McCabe-Thiele!I86	Mostrar/ocultar el número de etapas mín.
Mostrar.Pseudoeq	Resolución McCabe-Thiele!I103	Mostrar/ocultar pseudoequilibrio
Nm	Líneas de Tendencia!D204	Número de etapas mínimas
Np	Líneas de Tendencia!C301	Número de etapas
P.trabTorr	Equilibrio!B25	Presión de trabajo en Torr
Paso.q	Líneas de Tendencia!C180	Distancia en $x$ a graficar la línea $q$
presion	Resolución McCabe-Thiele!E5	Presión del sistema
q	Resolución McCabe-Thiele!C68	Valor $q$
q.equilibrio.tan	Resolución McCabe-Thiele!F71	$x$ en el que toca el eq. o es tangente
qb	Resolución McCabe-Thiele!C70	Intercepto de la línea $q$
qm	Resolución McCabe-Thiele!C69	Pendiente de la línea $q$
Qt	Resolución McCabe-Thiele!C119	Calor perdido en el sistema
Qt.user	Resolución McCabe-Thiele!G13	Calor perdido en el sistema, ingresado
RelRefl	Resolución McCabe-Thiele!J81	Relación de reflujo
Rmin	Resolución McCabe-Thiele!C74	Relación de reflujo mínimo
SISTEMA	Resolución McCabe-Thiele!B5	Sistema elegido para el cálculo

Cuadro XIII.4: Rangos con nombre asignado en la hoja de cálculo (final)

Nombre	Rango en la hoja de cálculo	Descripción
T.ref	Resolución McCabe-Thiele!V31	Temperatura de referencia
Tangencia	Resolución McCabe-Thiele!E68	Tangencia/sin tangencia
Tc.1	Resolución McCabe-Thiele!U40	Temperatura crítica, compuesto 1
Tc.2	Resolución McCabe-Thiele!U41	Temperatura crítica, compuesto 2
TipoDest	Resolución McCabe-Thiele!C19	Tipo de destilación
Tr.1	Resolución McCabe-Thiele!V40	Temperatura reducida, compuesto 1
Tr.2	Resolución McCabe-Thiele!V41	Temperatura reducida, compuesto 2
Tsat.D	Resolución McCabe-Thiele!I46	Temperatura de saturación
Tsat.F	Resolución McCabe-Thiele!I29	Temperatura de saturación
Tsat.G	Resolución McCabe-Thiele!I60	Temperatura de saturación
Tsat.G1	Resolución McCabe-Thiele!I53	Temperatura de saturación
Tsat.W	Resolución McCabe-Thiele!I39	Temperatura de saturación
U1.C1	Datos del usuario!E33	Constante para $C_p$ , ingresada
U1.C2	Datos del usuario!F33	Constante para $C_p$ , ingresada
U1.C3	Datos del usuario!G33	Constante para $C_p$ , ingresada
U1.C4	Datos del usuario!H33	Constante para $C_p$ , ingresada
U1.C5	Datos del usuario!I33	Constante para $C_p$ , ingresada
U1.L1	Datos del usuario!E39	Constante para $\lambda$ , ingresada
U1.L2	Datos del usuario!F39	Constante para $\lambda$ , ingresada
U1.L3	Datos del usuario!G39	Constante para $\lambda$ , ingresada
U1.L4	Datos del usuario!H39	Constante para $\lambda$ , ingresada
U1.LTc	Datos del usuario!I39	Temperatura crítica, ingresada
U2.C1	Datos del usuario!E34	Constante para $C_p$ , ingresada
U2.C2	Datos del usuario!F34	Constante para $C_p$ , ingresada
U2.C3	Datos del usuario!G34	Constante para $C_p$ , ingresada
U2.C4	Datos del usuario!H34	Constante para $C_p$ , ingresada
U2.C5	Datos del usuario!I34	Constante para $C_p$ , ingresada
U2.L1	Datos del usuario!E40	Constante para $\lambda$ , ingresada
U2.L2	Datos del usuario!F40	Constante para $\lambda$ , ingresada
U2.L3	Datos del usuario!G40	Constante para $\lambda$ , ingresada
U2.L4	Datos del usuario!H40	Constante para $\lambda$ , ingresada
U2.LTc	Datos del usuario!I40	Temperatura crítica, ingresada
User.Comp1	Datos del usuario!D7	Nombre del compuesto 1, ingresado
User.Comp2	Datos del usuario!D8	Nombre del compuesto 2, ingresado
User.M1	Datos del usuario!D27	Masa molar ingresada por el usuario
User.M2	Datos del usuario!D28	Masa molar ingresada por el usuario
User.Ptrab	Datos del usuario!D30	Presión de trabajo ingresada
x.ascendente	Líneas de Tendencia!B138:B178	Rango de datos $x$ en forma ascendente
x.descendente	Líneas de Tendencia!D138:D178	Rango de datos $x$ en forma descendente
xD	Resolución McCabe-Thiele!I45	Composición del destilado
xD.user	Resolución McCabe-Thiele!C13	Composición del destilado, valor ingresado
xW	Resolución McCabe-Thiele!I38	Composición del residuo
xW.user	Resolución McCabe-Thiele!C15	Composición del residuo, valor ingresado
y.ascendente	Líneas de Tendencia!A138:A178	Rango de datos $y$ en forma ascendente
y.descendente	Líneas de Tendencia!C138:C178	Rango de datos $y$ en forma descendente
y.G1	Resolución McCabe-Thiele!I52	Composición del gas de salida de la torre
yG	Resolución McCabe-Thiele!I59	Composición del vapor vivo entrante
zF	Resolución McCabe-Thiele!I28	Composición de la alimentación
zF.user	Resolución McCabe-Thiele!C11	Comp. de la alimentación, valor ingresado

## B. Manual de usuario del simulador

Se incluyen a continuación dos manuales para facilitar el uso del simulador al usuario:

1. Un manual para realizar el cálculo de los datos de equilibrio.
2. Un manual para realizar el método de McCabe-Thiele en el simulador.

El estudiante puede sacarle fotocopia a estos manuales y doblarlos tal y como se indica en las instrucciones de cada manual. Se realizaron los manuales en un *Pocket-Mod* por su facilidad de uso. Requiere solamente un lado de la hoja por lo que puede utilizar una hoja reciclada.

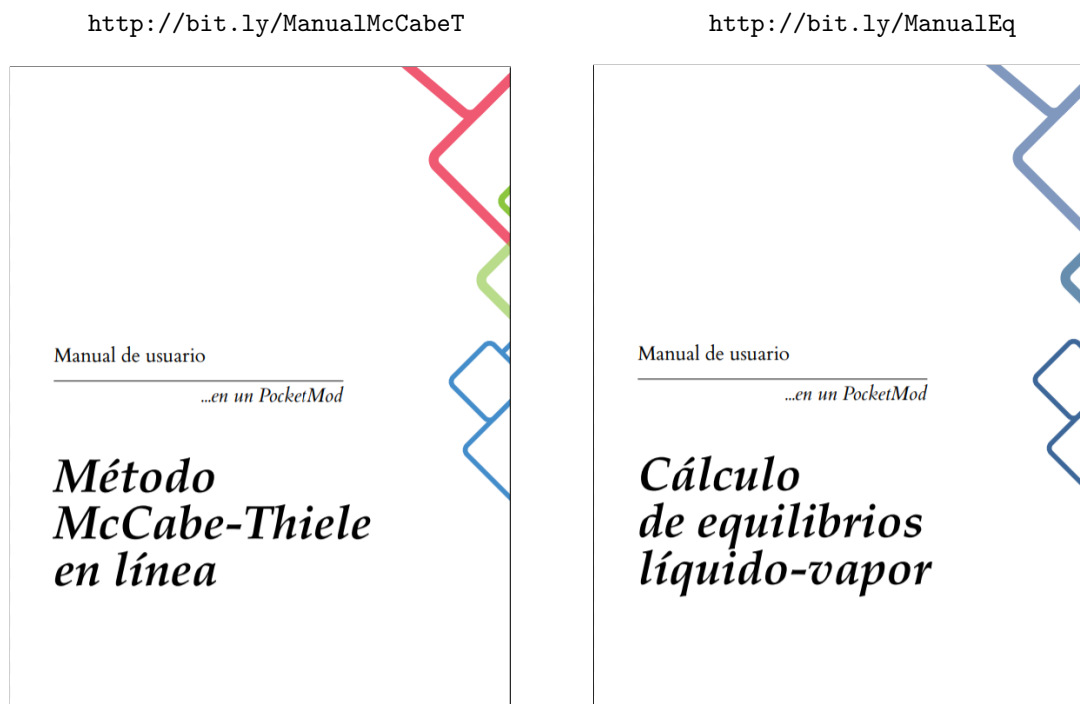


Figura XIII.34: Códigos QR de acceso a los manuales

(a) McCabe-Thiele

(b) Cálculo de equilibrio



Nota: Puede conseguir el simulador en el siguiente enlace:  
<http://bit.ly/SpEstCpoy>

### Procedimiento

Ir a la pestaña **Resolución McCabe-Thiele**

Elegir el sistema binario a utilizar.

Sistema
1-Propanol (1), Agua (2)
2-Propanol (1), Agua (2)

Elija la presión a la que desea trabajar:

1
0.978

1

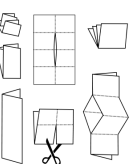
Si el sistema que desea no se encuentra, puede elegir la opción para ingresar sus propios datos. Vaya a la pestaña **Datos del usuario** para ingresar todos los datos personalizados. Luego elija el sistema *Usuario: Datos ingresados*

Tetracloruro de carbono (1), Benceno (2)
Tetrahidrofurano (1), Agua (2)
Usuario: Datos ingresados

Ingrese las composiciones de alimentación ( $z_F$ ), de destilado ( $x_D$ ) y de residuo ( $x_W$ ). Puede elegir ingresar los valores en porcentaje masa o porcentaje mol.

$z_F$	% mol
$x_D$	% mol
$x_W$	% Masa
	% mol

2



Instrucciones para doblar este Pocket-Mod:  
Modi:

C	h/cm	1.04383838
J	h/cm	1.72727273
Sección de Ajustamiento		
D	h/cm	0.4383838
E	h/cm	0.383838
Escala de velocidad de flujo		
Q	kg/h	1.196522
QD	kg/h	0.9955555556
QW	kg/h	0.0000000000
D	kg/h	1.196522
A	kg/h	0.8956565657
QD	kg/h	0.7472727273
D	kg/h	1.3943510435

Q	kg/h	1.196522
A	kg/h	0.8956565657
QD	kg/h	0.7472727273
D	kg/h	1.3943510435

Obtendrá también los resultados de los balances.

Ingrese el flujo de alimentación ( $F$ ) y el flujo de calor perdido ( $Q_c$ ), en caso de no incluir  $Q_c$  puede colocar 0 kg/h o dejar la celda en blanco.

F	kmol/h
Qc	kg/h

Elegir el tipo de destilación a trabajar, el tipo de alimentación y la temperatura de referencia.

Tipo de destilación: **Liq. subenfriado**

Tipo de alimentación: **Liq. subenfriado**

Temperatura de referenc: **Liq. subenfriado**

Temperatura de referenc: **Liq. subenfriado**

Temperatura de referenc: **Liq. subenfriado**

Temperatura de referenc: **Liq. subenfriado**

3

No Mostrar
No Mostrar
Mostrar

Obtendrá el diagrama de McCabe-Thiele. Puede ocultar algunas líneas del diagrama seleccionando la opción *No Mostrar*:

EmE Ingrese EmE **EmE**

Si trabajará con eficiencia ingrese el valor deseado.

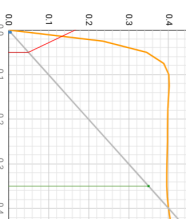
Sin valor (usar Em=1)
Em del vapor
Em del líquido

Elegir el tipo de eficiencia a utilizar o elegir la opción *Sin valor*, para no tomarla en cuenta.

Dependiendo de su elección en los campos anteriores, en las celdas rojas se le solicitará (o no) más información. Se mostrará una gráfica en la que se

% de Vapor

presenta el equilibrio y la curva  $q$ . Prestar atención al cruce de la curva  $q$  con el equilibrio.



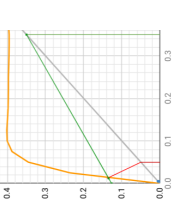
Elegir si habrá tangencia o no al diagramar la curva de enriquecimiento.

Sin Tangencia

4

No veces Rmin

Seleccionar cómo ingresará la Relación de Reflujo.



Al ingresar el valor correcto aparecerá la curva de enriquecimiento mínimo cruzando con la curva  $q$  y el equilibrio en el mismo punto.

x

Ingresar el valor en  $x$  en el cual se cruza la curva  $q$  con el equilibrio.

# Método McCabe-Thiele en línea

...en un PocketMod

Manual de usuario



**Nota:** Puede conseguir el simulador en el siguiente enlace:  
<http://bit.ly/SpEstCopy>

### Paso 1

Eligir en la lista desplegable el sistema a trabajar, se cuenta con 19 sistemas binarios.

**Sistema**

Nota: Las col. 1-Propanol (1), Agua (2)  
 2-Propanol (1), Agua (2)

### Paso 2

Insertar en el cuadro gris la presión de trabajo en atmósferas.

P_trab	1	Atm
	0	Torr
	0.00	Psi

1

# Cálculo de equilibrios líquido-vapor

Manual de usuario

...en un PocketMod

### Paso 3

Insertar en todas las celdas de la columna de temperaturas, un valor de temperaturas arbitrario (p.ej. 101 en todas las celdas).

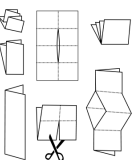
T (°C)	101.0000
	101

La hoja hará todos los cálculos a esas temperaturas, pero las presiones obtenidas no serán iguales a la presión de trabajo.  
 En la columna P\_tot/P\_trab se hace una división entre estas presiones. El valor debe ser igual a 1 para que sean iguales. Si no son iguales aparece en azul.

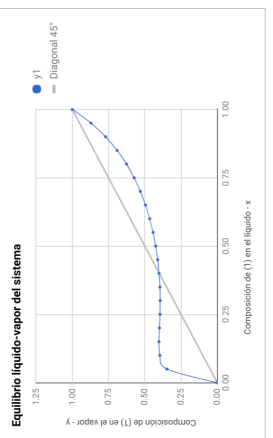
P_tot/P_trab	1.0365
	1.5481

2

7

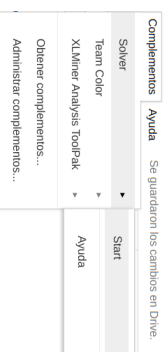


Mod:  
 Instrucciones para doblar este Pocket-



Quando se resuelva mediante *Solver* cada una de las filas se tendrá completo el conjunto de datos de equilibrio (x, y\* y T) y la gráfica correspondiente.

Iniciar el complemento *Solver* en el menú.



Ingresar como celda objetivo la celda en la columna K, el objetivo es que tenga un valor de 1, la celda a cambiar es la temperatura en la columna E.

**Solver**

Set Objective: K32

To:  Max  Min  Value Of: 1

By Changing Variable Cells: E32

Subject to the Constraints:

3

9

Volver a resolver el sistema hasta que todas las celdas en la columna K sean color negro.

**Solver**

Set Objective: K33

To:  Max  Min  Value Of: 1

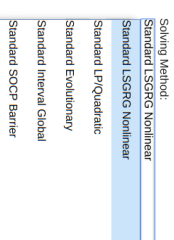
By Changing Variable Cells: E33

Cambiar la celda objetivo y la celda a modificar.

P_tot/P_trab	1.5481
	1.0000
	1.0000

Pasar a la siguiente celda.

Elegir el método no lineal para resolver el sistema.



Presionar el botón *Solve*.

**Solve**

Esperar a que se completen los cálculos de optimización.



4

5

0.0000	TOT
8966	66
	(C.) T

En la columna de E se tendrá ahora la T correcta.

1.5481	T
1.0000	T
	P_tot/P_trab

El valor en la celda objetivo habrá cambiado a 1.



Quando aparezca el siguiente mensaje se habrá completado la optimización.

## C. Comparación de un problema resuelto con el simulador y manualmente

### 1. Problema resuelto con el simulador

#### a. Problema 9.15 del libro Treybal (1988)

#### Problema

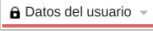
Se va a fraccionar continuamente una disolución de tetracloruro de carbono y disulfuro de carbono que contiene 50 % en peso de cada uno de ellos, a presión atmosférica, a un flujo de 4000 kg/h. El producto destilado va a contener 95 % en peso de disulfuro de carbono y el residuo 0.5 %. Se va a evaporar 30 % en mol de la alimentación antes de que entre en la torre. Se utilizará un condensador total; el reflujo va a regresarse a su punto de burbuja. Los datos en el equilibrio (*The Chemical Engineers' Handbook*, 4a. ed., p. 13-5),  $x, y$  = fracción mol de  $\text{CS}_2$ :

Cuadro XIII.5: Datos de equilibrio dados por el problema

$t, ^\circ\text{C}$	$x$	$y^*$	$t, ^\circ\text{C}$	$x$	$y^*$
76.7	0.0000	0.0000	59.3	0.3908	0.6340
74.9	0.0296	0.0823	55.3	0.5318	0.7470
73.1	0.0615	0.1555	52.3	0.6630	0.8290
70.3	0.1106	0.2660	50.4	0.7574	0.8780
68.6	0.1435	0.3325	48.5	0.8604	0.9320
63.8	0.2585	0.4950	46.3	1.0000	1.0000

1. Calcule el flujo de los productos, kg/h.
2. Calcule la relación de reflujo mínimo.
3. Calcule el número mínimo de platos ideales, gráficamente o por la ecuación (9.85).
4. Calcule el número de platos teóricos que se requieren en una relación de reflujo igual al doble del mínimo y la posición del plato de alimentación. **Respuesta:** 12.5 platos ideales
5. Calcule la eficiencia global del plato de una torre de platos perforados de diseño tradicional y el número de platos reales.
6. Utilizando la temperatura del destilado como la temperatura base, calcular la entalpía de la alimentación, los productos y el vapor que entra en el condensador. Calcule las cargas térmicas del condensador y del rehervidor. Los calores latentes y específicos se encuentran en *The Chemical Engineers' Handbook*, 5a. ed., pp. 3-116 y 3-129.

## Resolución

Primero es importante ver que el sistema Disulfuro de carbono-Tetracloruro de carbono no se encuentra en la base de datos del simulador. Por ello debe ir a la pestaña  para llenar los datos del sistema. En esta pestaña hay 21 espacios para datos de equilibrio mientras que en el problema (Cuadro XIII.5) nos dieron únicamente 12. Se completaron los datos obteniendo promedios entre las parejas de datos, los datos añadidos se muestran en el Cuadro XIII.6 en letras negritas.

Cuadro XIII.6: Datos de equilibrio completados para tener 21 concentraciones

$t, ^\circ\text{C}$	$x$	$y^*$
76.7	0.0000	0.0000
<b>75.8</b>	<b>0.0148</b>	<b>0.0415</b>
74.9	0.0296	0.0823
<b>74.0</b>	<b>0.0456</b>	<b>0.1189</b>
73.1	0.0615	0.1555
<b>71.7</b>	<b>0.0861</b>	<b>0.2108</b>
70.3	0.1106	0.2660
68.6	0.1435	0.3325
<b>66.2</b>	<b>0.2010</b>	<b>0.4138</b>
63.8	0.2585	0.4950
59.3	0.3908	0.6340
<b>57.3</b>	<b>0.4613</b>	<b>0.6905</b>
55.3	0.5318	0.7470
<b>53.8</b>	<b>0.5974</b>	<b>0.7880</b>
52.3	0.6630	0.8290
<b>51.4</b>	<b>0.7102</b>	<b>0.8535</b>
50.4	0.7574	0.8780
<b>49.4</b>	<b>0.8089</b>	<b>0.9050</b>
48.5	0.8604	0.9320
<b>47.4</b>	<b>0.9302</b>	<b>0.9660</b>
46.3	1.0000	1.0000

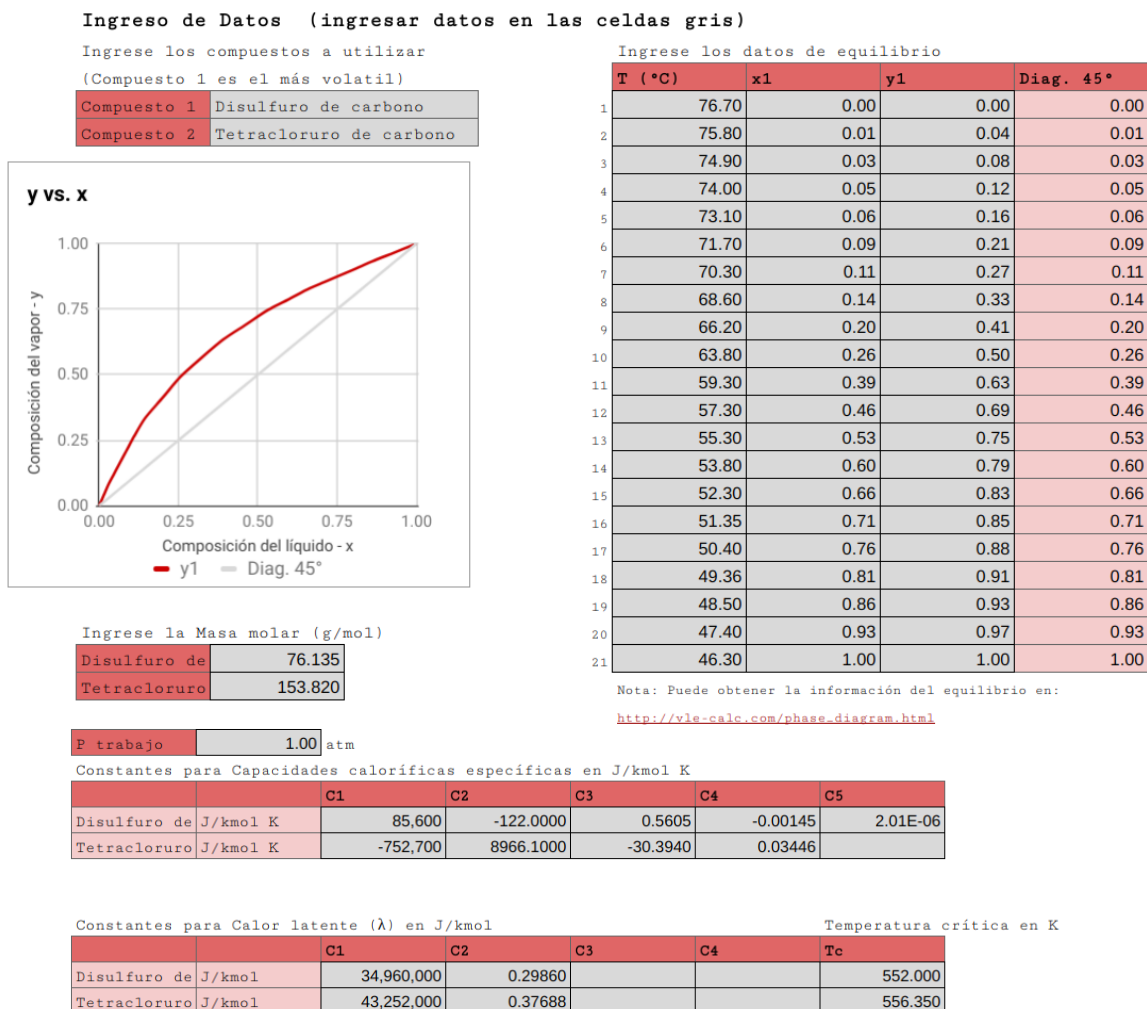
Se buscaron luego los datos de los compuestos Disulfuro de Carbono (*Carbon Disulfide*, compuesto no. 48 en el Perry<sup>5</sup>) y Tetracloruro de carbono (*Carbon Tetrachloride*, compuesto no. 50). Los datos se obtuvieron de los siguientes cuadros de la misma edición del Manual Perry:

1. La masa molar se puede encontrar en el Cuadro 2-153
2. Constantes para el cálculo de la capacidad calorífica específica en el Cuadro 2-153
3. Constantes para el cálculo del calor latente ( $\lambda$ ) en el Cuadro 2-150
4. Temperatura crítica en el Cuadro 2-141

Se ingresan todos los datos requeridos en la pestaña tal y como se muestra en la Figura XIII.35. Se ingresa también como presión de trabajo 1 atm ya que según indicación del problema se trabajará a presión atmosférica.

<sup>5</sup>Don W. Green y R. Perry (2008). *Perry's Chemical Engineers' Handbook Eighth Edition*. 8.<sup>a</sup> ed. McGraw-Hill, Inc.

Figura XIII.35: Datos del sistema ingresados para la resolución del problema



Seguidamente se debe ir a la pestaña [Resolución McCabe-Thiele](#) para resolver el resto del problema. Se debe trabajar con la hoja de cálculo vacía tal y como se muestra en la Figura XIII.36. Borrar cualquier dato que se encuentra en las celdas antes de iniciar para evitar confusiones.

Figura XIII.36: Hoja de cálculo en blanco para iniciar a resolver el problema

**Balance de masa y energía** Ver manual de usuario en: <http://bit.ly>

**Paso 1**  
 Seleccionar el sistema a utilizar: Presión (atm):  
 Sistema  Presión

**Paso 2**  
 Ingrese los siguientes datos:

$z_F$   % mol  $F$   kmol/h  
 $x_D$   % mol  $Q_t$   kJ/h (Opcional, Calor perdido en el sistema)  
 $x_W$   % mol

**Paso 3**  
 Tipo de destilación:   
 Tipo de alimentación:  #N/A #N/A  
 Temperatura de referencia:

Seleccionar el sistema **Usuario: Datos ingresados** ya que hemos ingresado la información del sistema Disulfuro de carbono-Tetracloruro de carbono. En la presión nos aparecerá únicamente la presión que ingresamos y deberemos seleccionarla. En este caso 1 atm.

Figura XIII.37: Selección del sistema que hemos ingresado

Seleccionar el sistema a utilizar: Presión (atm):  
 Sistema **Usuario: Datos ingresados**  1  
 (Disulfuro de carbono y Tetracloruro de carbono)  1

Ingresamos ahora las composiciones que nos indica el problema para la alimentación, destilado y residuo. Tomar en cuenta que el problema nos indica dichas composiciones en porcentaje peso, o lo que es lo mismo, en porcentaje masa por lo que debemos seleccionar adecuadamente las unidades en la lista desplegable al lado de cada composición tal y como se muestra en la Figura XIII.38. El problema también nos indica que el flujo de alimentación será de 4000 kg/h. No nos indica pérdidas de calor por lo que esta celda la dejamos en blanco tal y como se muestra en la Figura XIII.38.

Figura XIII.38: Ingreso de los datos del problema

$z_F$   50 % Masa  $F$   4000 kg/h  
 $x_D$   95 % Masa  $Q_t$   kJ/h  
 $x_W$   0.5 % Masa  
 % Masa  
 % mol

Se selecciona luego el tipo de destilación que es mediante rehervidor. Será la única opción en la lista ya que no se trabaja mediante vapor vivo en los casos en los que no se separa agua como el componente menos volátil. La alimentación será una mezcla de **Líquido + Vapor** ya que el problema indica que *se va a evaporar 30 % en mol de la alimentación antes de que entre en la torre*.

Figura XIII.39: Selección de las condiciones de destilación

**Paso 3**

Tipo de destilación: **Rehervidor** ▼

Tipo de alimentación:

Temperatura de referencia:

Liq. subenfriado T.entrada  
 Liq. subenfriado Moles condensados  
 Líquido saturado  
 Líquido + Vapor  
 Vapor Saturado  
 Vapor Sobrecalentado

Ya sabemos entonces que 30% de la alimentación será vapor, entonces colocamos dicho valor en la celda roja. Tal y como se muestra en la Figura XIII.40. Seleccionamos como temperatura de referencia la temperatura de saturación del destilado tal y como lo indica el inciso 6 del problema.

Figura XIII.40: Ingresar un 30% de vapor en la alimentación

**Paso 3**

Tipo de destilación: **Rehervidor** ▼

Tipo de alimentación: **Líquido + Vapor** ▼

Temperatura de referencia: **Tsat D** ▼

	<b>% de Vapor</b>	<b>30</b>	Ingrese el % de vapor en la alimentación
--	-------------------	-----------	--

Con esta información ingresada la hoja de cálculo ya puede resolver los calores latentes, las capacidades caloríficas y las entalpías de los flujos de alimentación, residuo, destilado, y el vapor a la salida de la torre que entra en el condensador. Esta información es la que se requería en el **Inciso 6** del problema y se muestra en la Figura XIII.41. En la parte de abajo de la hoja, Figura XIII.42, se muestran también algunos otros resultados que ya se calcularon. Se tienen ya los flujos  $D$  y  $W$  en kg/h que era lo que se solicitaba en el **Inciso 1** así como las cargas térmicas del condensador y del rehervidor, solicitadas en el **Inciso 6**. Aún no aparecen los flujos de líquido y vapor en las secciones de la torre ya que aún no se ha completado la resolución.

Figura XIII.41: Entalpías de las corrientes del sistema

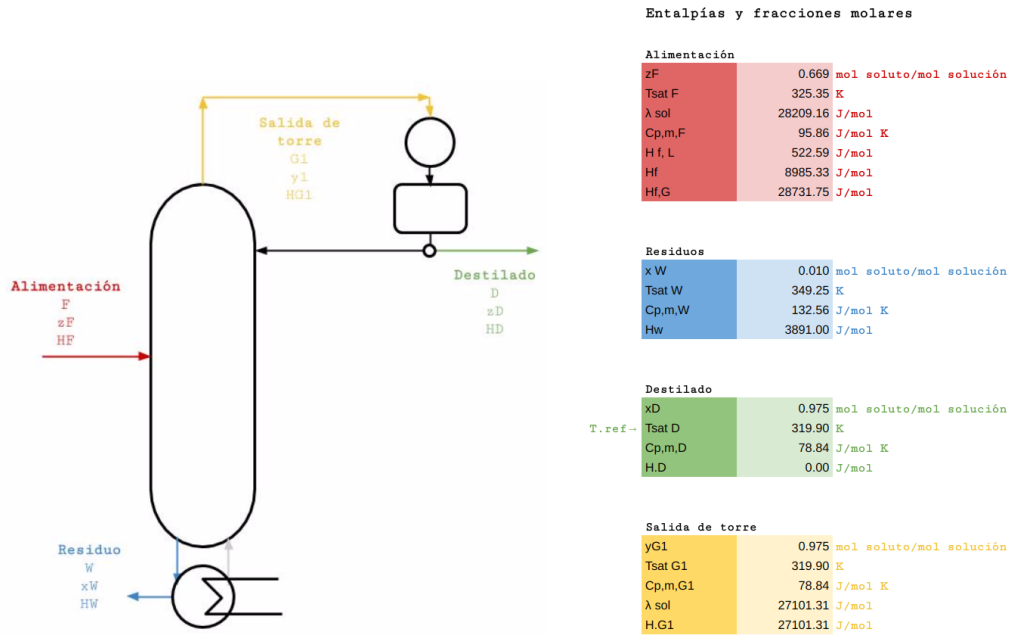


Figura XIII.42: Resolución de los balances de masa

Resolución del balance de masa y energía

F	39271.34 mol/h
Qt	0.00 J/h

Matriz

Ax=B				
D	W	Qc	Qb	B (constantes)
1	1	0	0	39271.34 mol/h
0.97	0.01	0.00	0.00	26269.13 mol/h
27101.31153	0	-1	0	0 J/mol
0.00	3891.00	1	-1	352866119.81 J/h

x=A<sup>-1</sup>B

Matriz inversa				x (resultados)
-0.0104	1.0367	0.0000	0.0000	26825.10 D
1.0104	-1.0367	0.0000	0.0000	12446.23 W
-282.3900	28097.0638	-1.0000	0.0000	726995508.3 Qc
3649.1518	24063.1028	-1.0000	-1.0000	422557662.92 Qb

Resultados

D	26825.10 mol/h
	2095.24 kg/h
W	12446.23 mol/h
	1904.76 kg/h
Qc	726995508.3 J/h
	726995.5 kJ/h
Qb	422557662.92 J/h
	422557.7 kJ/h

Flujos de líquido y vapor

Sección de enriquecimiento

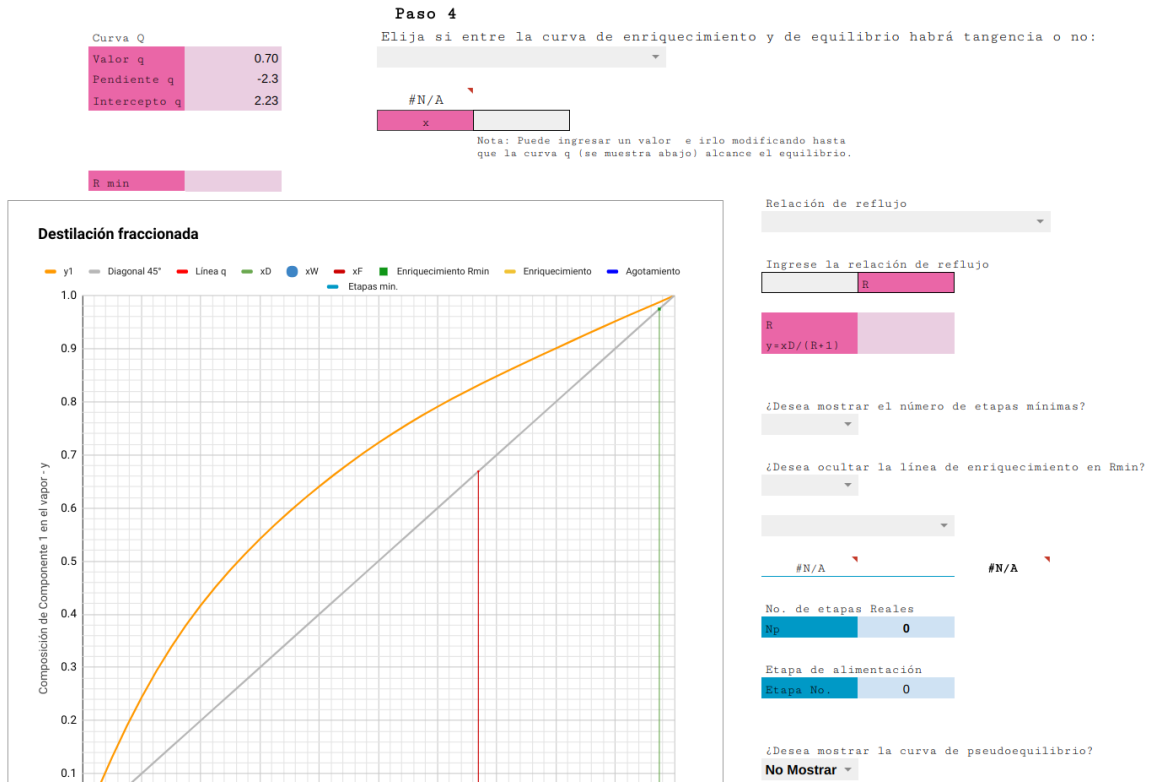
L	#DIV/0!	mol/h
G	#DIV/0!	mol/h

Sección de agotamiento

L	#DIV/0!	mol/h
G	#DIV/0!	mol/h

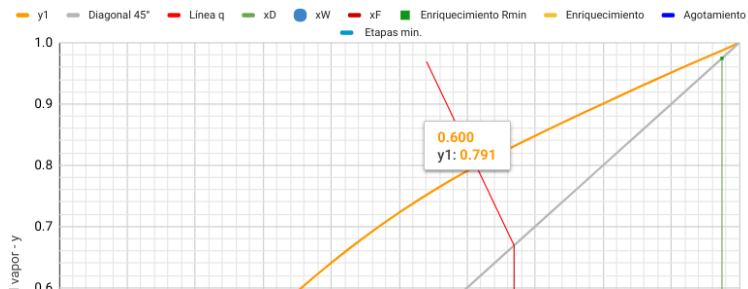
Siguiendo con la resolución, el **Inciso 2** nos solicita calcular el reflujo mínimo. Para ello se prosigue con el paso 4 mostrado en la Figura XIII.43. Se nos pregunta si la curva de enriquecimiento tendrá tangencia con el equilibrio. Viendo la gráfica vemos que no habrá tangencia ya que el equilibrio no se acerca a la diagonal de 45° sino solo en los extremos. Seleccionamos por tanto la opción **Sin Tangencia**.

Figura XIII.43: Continuación del método gráfico McCabe-Thiele



Aparece entonces la curva  $q$  un poco extendida. Debemos ingresar el valor en el que esta línea se cruza con el equilibrio. Si seleccionamos la gráfica y posicionamos el cursor cerca podemos ver, tal y como se muestra en la Figura XIII.44 los valores de los puntos cercanos, en este caso aparece  $x = 0.600$ .

Figura XIII.44: Búsqueda de la intersección entre la línea  $q$  y el equilibrio.



Insertamos en la celda este primer valor.

Figura XIII.45: Valor  $x = 0.600$  ingresado

**Paso 4**  
 Elija si entre la curva de enriquecimiento y de equilibrio habrá tangencia o no:  
  
 Ingrese el valor de  $x$  en el que la curva  $q$  intercepta la curva de equilibrio:  
   
 Nota: Puede ingresar un valor e irlo modificando hasta que la curva  $q$  (se muestra abajo) alcance el equilibrio.

Una vez ingresado este valor se dibuja la línea de enriquecimiento que cruza este punto. Como se puede apreciar en la Figura XIII.46 no es el valor correcto ya que sobrepasa la curva de equilibrio y no es el intercepto con la línea  $q$ . Debe ser un valor más grande. Después de probar otros valores se encontró que el valor  $x = 0.614$  es el correcto y la línea de enriquecimiento cruza adecuadamente el equilibrio y la línea  $q$  tal y como se muestra en la Figura XIII.47.

Figura XIII.46: Enriquecimiento cruzando en  $x = 0.600$

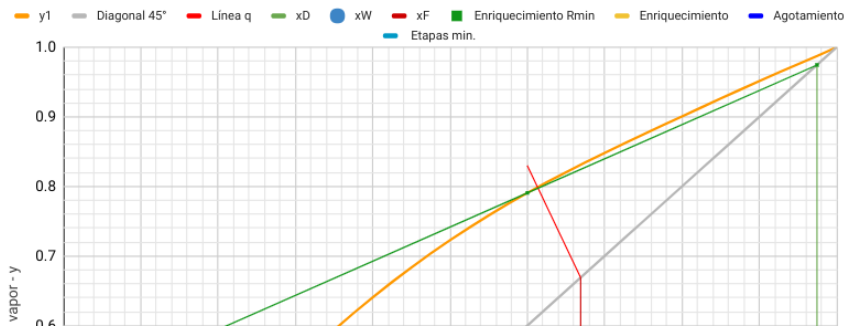
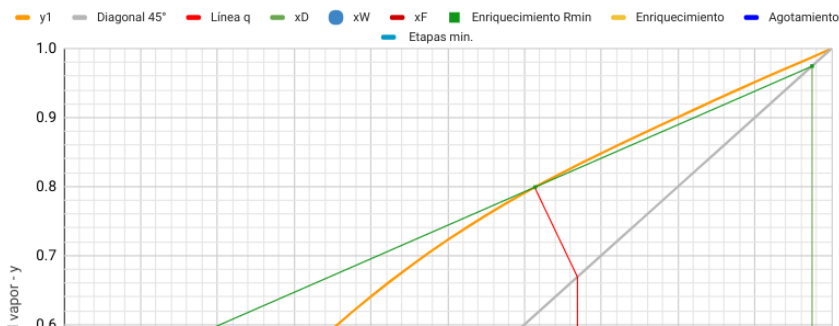


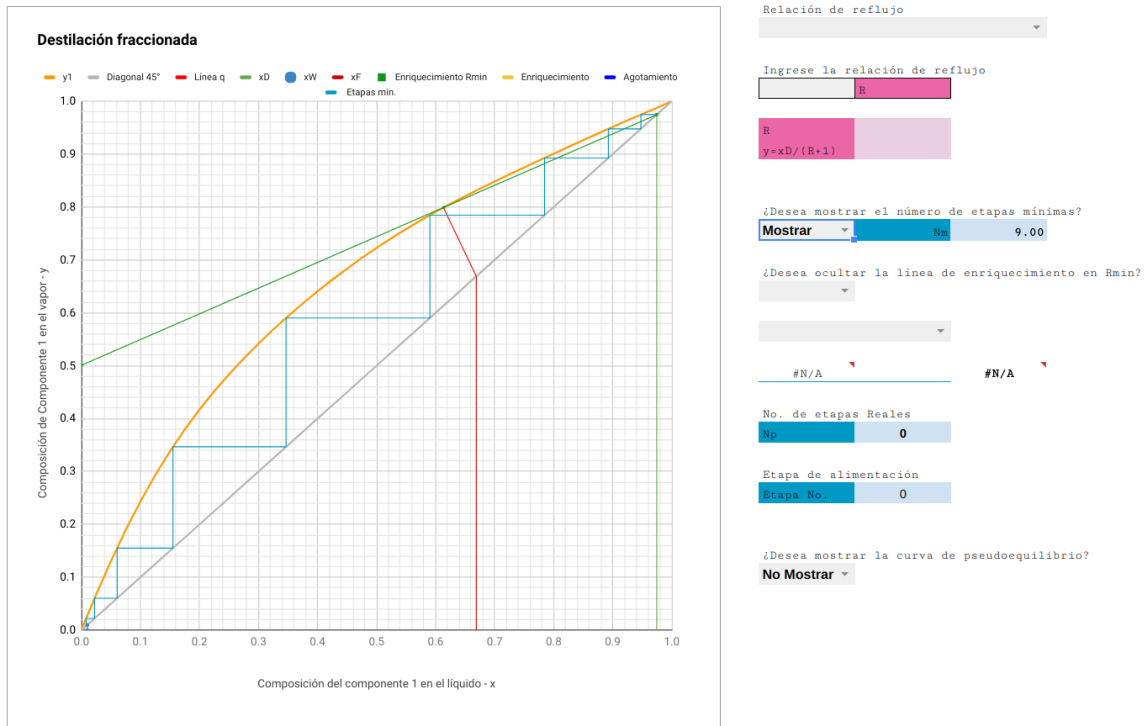
Figura XIII.47: Enriquecimiento cruzando en  $x = 0.614$



Esta línea es por tanto la línea de enriquecimiento mínimo. Ya teniendo dicha línea aparece en las celdas rosadas el valor de  $R_{min}$ :

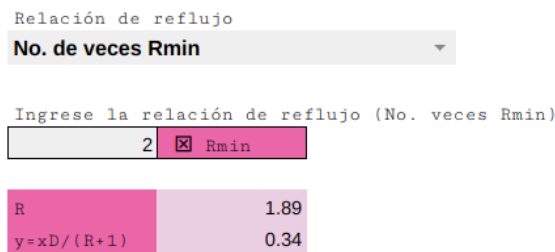
El **Inciso 3** del problema nos solicita el número mínimo de platos ideales. En la hoja de cálculo esto se obtiene gráficamente. Para ello en donde pregunta si deseamos mostrar el número de etapas mínimas debemos seleccionar **Mostrar** en la lista desplegable. Nos aparece en la gráfica, el diagrama de escalera de las etapas mínimas. También ha aparecido en las celdas celestes que son 9 el número de etapas mínimas requeridas.

Figura XIII.48: Número de etapas mínimas requeridas en el problema.



En el **Inciso 4** nos pide el número de platos teóricos para  $R = 2R_{min}$  y la posición del plato de alimentación. Por ello seleccionamos la opción **No. de veces Rmin** colocando en la celda el valor correspondiente como se muestra en la Figura XIII.49. Se obtiene el valor de  $R$  y el intercepto para la nueva línea de enriquecimiento.

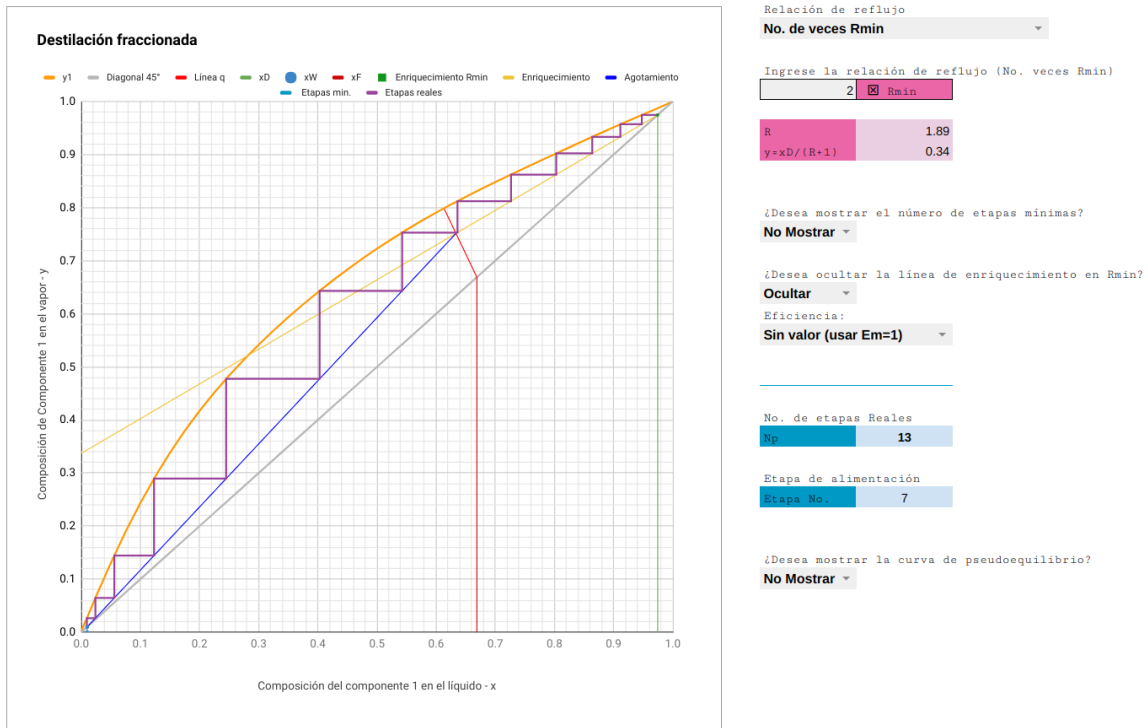
Figura XIII.49: Relación de reflujo utilizada



El problema solicita los platos teóricos, es decir el  $N_p$  en caso de ser el sistema completamente eficiente. Por ello se elige como eficiencia la opción **Sin valor (usar Em=1)**. Al elegir esta opción se muestra en la gráfica el diagrama en escalera de las etapas y nos aparece que se requieren 13 etapas y que se debe alimentar en la etapa 7 (Figura XIII.50). Ahora que se ha resuelto completamente el método de McCabe-Thiele obtenemos ya los flujos de líquido y vapor en cada sección de la torre ( $G$ ,  $L$ ,  $\bar{G}$  y  $\bar{L}$ ) en la parte de abajo de la hoja de cálculo.

En el **Inciso 5** nos solicita calcular la eficiencia global del plato para una torre de platos perforados de diseño tradicional y el número de platos reales. Primero se calcula la eficiencia. En el libro *Operaciones de transferencia de masa* (Treybal, 1988; p.209) se presenta la correlación de O'Connell para calcular la eficiencia global de los platos ( $E_o$ ).

Figura XIII.50: Diagrama McCabe-Tiele con las etapas teóricas



Menciona que esta correlación se realizó para platos de capucha pero puede utilizarse aún para platos perforados. En el Manual Perry (Green y Perry, 2008; p.14-53) se le llama Eficiencia global de la columna ( $E_{oc}$ ). La correlación de O'Connell permite obtener gráficamente la eficiencia, pero la ecuación de Lockett, presentada en el Perry, expresa dicha correlación de la siguiente manera:

$$E_{oc} = 0.492(\mu_L \alpha)^{-0.245} \quad (\text{XIII.1})$$

En donde  $\mu_L$  es la viscosidad del líquido alimentado en centipoise y  $\alpha$  es la volatilidad relativa. Primero calculamos la volatilidad relativa sabiendo que:

$$\alpha = \frac{y^*/(1-y^*)}{x/(1-x)} = \frac{y^*(1-x)}{x(1-y^*)} \quad (\text{XIII.2})$$

Con los datos de equilibrio que se tienen en el Cuadro XIII.5 se empleó la Ecuación (XIII.2) para cada concentración de  $x$ , excepto  $x = 0.00$  y  $x = 1.00$  y se realizó un promedio de todas las volatilidades obtenidas con lo cual se obtuvo que  $\alpha = 2.628319$ .

Para obtener la viscosidad de la solución a la entrada ( $\mu_L$ ), el Manual Perry presenta la siguiente ecuación para obtener viscosidad de mezclas líquidas a partir de la viscosidad de los compuestos (ibíd.; p.2-506):

$$\ln \mu = \sum_i^c x_i \ln(\mu_i) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^c \sum_{j=1}^c x_i x_j G_{ij} \quad (\text{XIII.3})$$

En la Ecuación (XIII.3), el segundo término se refiere a la interacción entre ambos compuestos y se obtiene experimentalmente. En este problema no se tiene dicha información, pero como en el Perry indican que este término es pequeño y puede tomarse como cero en la mayoría de los casos y,

como se desea únicamente una aproximación para resolver el problema, se utiliza únicamente con el primer término tal y como se muestra en la Ecuación (XIII.4):

$$\ln \mu = \sum_i^c x_i \ln(\mu_i) \quad (\text{XIII.4})$$

Para obtener la viscosidad de cada componente se utiliza el Cuadro 2-313 del manual Perry, en dicho cuadro se obtuvieron los siguientes datos:

Cuadro XIII.7: Datos para el cálculo de  $\mu$

Nombre	C1	C2	C3	C4	C5	$T_{min}$	$T_{max}$
Disulfuro de carbono	-10.306	703.01				161.58	441.60
Tetracloruro de carbono	-8.0738	1121.1	-0.4726			250.00	455.00

Al final de dicho cuadro se nos indica que estas constantes deben utilizarse en la siguiente ecuación:

$$\mu = \exp\left(C1 + \frac{C2}{T} + C3 \ln T + C4T^{C5}\right) \quad (\text{XIII.5})$$

En la ecuación anterior  $\mu$  se obtiene en Pa·s y  $T$  debe de utilizarse en Kelvin. Utilizamos la temperatura promedio de la torre, para ello se obtuvo el promedio de la Temperatura de equilibrio (sin tomar en cuenta los valores para  $x = 0.00$  y  $x = 1.00$ ) con lo que se obtuvo  $T = 61.2^\circ\text{C}$ . En Kelvin:

$$T = 61.2 + 273.15 = 334.35 \text{ K}$$

Sustituyendo los datos correspondientes se tiene:

$$\mu_{\text{Disulfuro de C.}} = \exp\left(-10.306 + \frac{703.01}{334.35}\right) = 0.000273726 \text{ Pa}\cdot\text{s}$$

$$\mu_{\text{Tetracloruro de C.}} = \exp\left(-8.0738 + \frac{1121.1}{334.35} + (-0.4726) \ln(334.35)\right) = 0.000571316 \text{ Pa}\cdot\text{s}$$

Convertimos ahora estas viscosidades a Centipoise:

$$\mu_{\text{Disulfuro de C.}} = 0.000273726 \text{ Pa}\cdot\text{s} * \frac{1000 \text{ Cp}}{1 \text{ Pa}\cdot\text{s}} = 0.273726 \text{ Cp}$$

$$\mu_{\text{Tetracloruro de C.}} = 0.000571316 \text{ Pa}\cdot\text{s} * \frac{1000 \text{ Cp}}{1 \text{ Pa}\cdot\text{s}} = 0.571316 \text{ Cp}$$

Sustituyendo ahora en la Ecuación (XIII.4) para obtener la viscosidad de la mezcla, sabiendo que en  $x_F = 0.5$  tenemos:

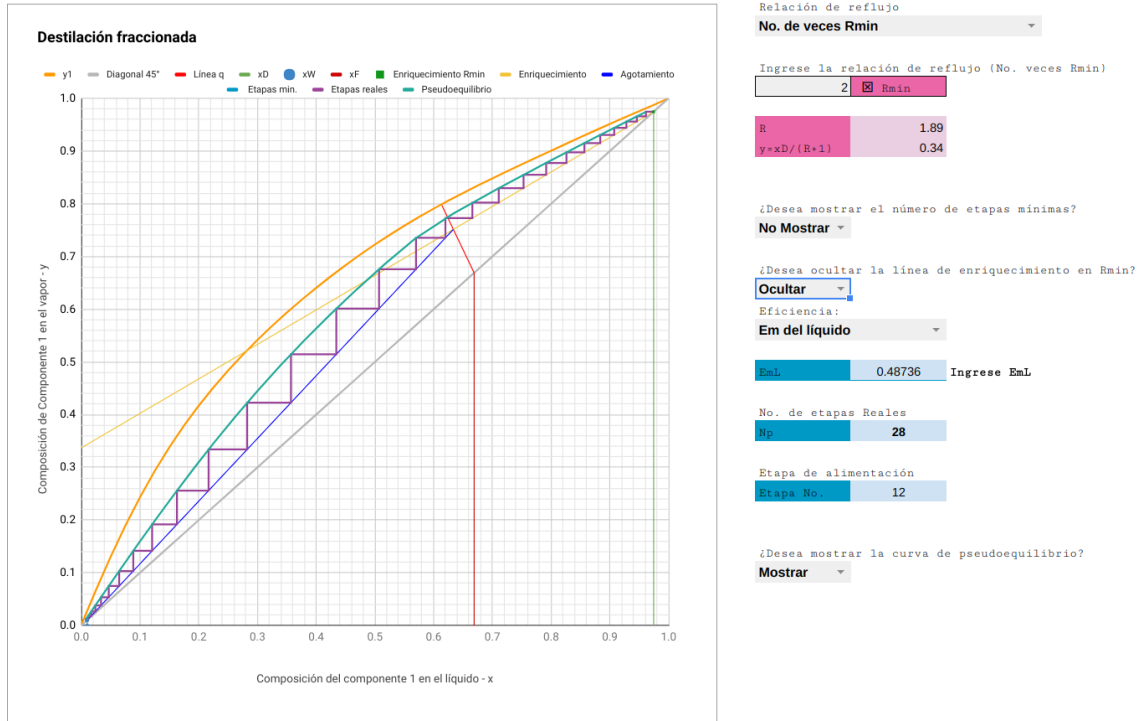
$$\ln \mu_L = 0.5 \ln(0.273726 \text{ Cp}) + 0.5 \ln(0.571316 \text{ Cp}) = -0.92772$$

$$\mu_L = \exp(-0.92772) = 0.395454 \text{ Cp}$$

Ya tenemos ahora los datos necesarios para obtener la eficiencia. Sustituyendo en la Ecuación (XIII.1):

$$E_{oc} = 0.492(\mu_L \alpha)^{-0.245} = 0.492(0.395454 * 2.628319)^{-0.245} = 0.487366$$

Se obtiene por tanto una eficiencia de 0.487366 o 48.7366 %. Ingresando esta eficiencia en el simulador se obtiene un nuevo diagrama en escalera. Se puede apreciar que ahora son 28 las etapas reales necesarias y se debe alimentar en la etapa 12.

Figura XIII.51: Etapas reales con  $E_{oc} = 0.48766$ 

## 2. Problema resuelto manualmente

### a. Problema 9.15 del libro Treybal (1988)

Se trabajará a continuación el problema de forma manual tal y como se realizaría sin el simulador. El inciso completo se presenta en la página 138. De dicho inciso se extraen los siguientes datos:

Sistema: Disulfuro de carbono y tetracloruro de carbono

$P = 1$  atm

$X_F = 0.50$  fracción masa

$X_D = 0.95$  fracción masa

$X_W = 0.005$  fracción masa

$F = 4000$  kg/h

30% vapor en la alimentación

$T_{ref} = T_{D_{sat}}$

### Resolución

El **Inciso 1** solicita calcular los flujos de productos en kg/h, para ello utilizaremos las fracciones masas ( $x$ ) y haremos el balance de masa y de materia:

$$F = W + D$$

$$FX_F = WX_W + DX_D$$

De lo anterior desconocemos  $D$  y  $W$ , por lo que tenemos 2 ec. y 2 incógnitas. Despejando y sustituyendo  $W$ :

$$W = F - D$$

$$\begin{aligned}
 FX_F &= (F - D)X_W + DX_D \\
 FX_F &= FX_w - DX_W + DX_D \\
 FX_F - FX_w &= D(X_D - X_W) \\
 D &= \frac{F(X_F - X_W)}{X_D + X_W} \\
 D &= \frac{4000 \text{ kg/h} (0.50 - 0.005)}{0.95 - 0.005} \\
 D &= 2095.2381 \text{ kg/h}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 W &= F - D \\
 W &= 4000 \text{ kg/h} - 2095.2381 \text{ kg/h} \\
 W &= 1904.7619 \text{ kg/h}
 \end{aligned}$$

Antes de seguir con el siguiente inciso, vamos a pasar las fracciones masa ( $X$ ) a fracciones mol, que es la forma en que están dados los datos de equilibrio en el problema y serán útiles en la resolución.

Para convertirlo utilizamos la ecuación presentada en el Marco Teórico:

$$z = \frac{\frac{Z}{M_1}}{\frac{Z}{M_1} + \frac{(1-Z)}{M_2}}$$

La masas molares de los compuestos son:

$$\begin{aligned}
 M_{\text{Disulfuro de C.}} &= 76.135 \\
 M_{\text{Tetracloruro de C.}} &= 153.82
 \end{aligned}$$

Por tanto:

$$\begin{aligned}
 x_F &= \frac{\frac{X_F}{M_{\text{Disulfuro de C.}}}}{\frac{X_F}{M_{\text{Disulfuro de C.}}} + \frac{(1-X_F)}{M_{\text{Tetracloruro de C.}}}} \\
 x_F &= \frac{\frac{0.5}{76.135}}{\frac{0.5}{76.135} + \frac{(1-0.5)}{153.82}} = 0.66891 \\
 x_D &= \frac{\frac{0.95}{76.135}}{\frac{0.95}{76.135} + \frac{(1-0.95)}{153.82}} = 0.97461 \\
 x_W &= \frac{\frac{0.005}{76.135}}{\frac{0.005}{76.135} + \frac{(1-0.005)}{153.82}} = 0.01005
 \end{aligned}$$

Calcularemos ahora la temperatura de saturación de cada una de las corrientes de salida utilizando las fracciones mol calculadas. Para obtenerlas se realizarán interpolaciones lineales entre los datos de equilibrio que nos presenta el problema. Recordemos que una interpolación lineal se realiza de la siguiente forma:

$$y = y_1 + (x - x_1) \frac{(y_2 - y_1)}{(x_2 - x_1)}$$

En este caso nuestro valor de  $y$  es en realidad la temperatura de saturación:

$$T_{sat} = T_{sat_1} + (x - x_1) \frac{(T_{sat_2} - T_{sat_1})}{(x_2 - x_1)}$$

Cuadro XIII.8: Datos para interpolación de  $x_F$ 

No.	$x$	T (°C)
1	0.6630	52.3
2	0.7574	50.4

Para  $x_F = 0.66891$  se realiza una interpolación entre los siguientes datos para obtener la temperatura de saturación.

$$T_{sat_F} = 52.3 + (0.66891 - 0.6630) \frac{(50.4 - 52.3)}{(0.7574 - 0.6630)} = 52.1810 \text{ °C}$$

$$T_{sat_F} = 52.1810 + 273.15 = 325.3310 \text{ K}$$

Para  $x_D = 0.97461$  la temperatura de saturación es:

Cuadro XIII.9: Datos para interpolación de  $x_D$ 

No.	$x$	T (°C)
1	0.8604	48.5
2	1.0000	46.3

$$T_{sat_D} = 48.5 + (0.97461 - 0.8604) \frac{(46.3 - 48.5)}{(1.0000 - 0.8604)} = 46.7001 \text{ °C}$$

$$T_{sat_D} = 46.7001 + 273.15 = 319.8501 \text{ K}$$

La temperatura de saturación del residuo que tiene una concentración de  $x_W = 0.01005$  es:

Cuadro XIII.10: Datos para interpolación de  $x_W$ 

No.	$x$	T (°C)
1	0.0000	76.7
2	0.0296	74.9

$$T_{sat_W} = 76.7 + (0.01005 - 0.0000) \frac{(74.9 - 76.7)}{(0.0296 - 0.0000)} = 76.0888 \text{ °C}$$

$$T_{sat_W} = 76.0888 + 273.15 = 349.2388 \text{ K}$$

El **Inciso 2** pide calcular la relación de reflujo mínimo, este se obtiene determinando el intercepto de la curva  $q$  con el equilibrio o encontrando la tangencia para la línea de enriquecimiento. En este caso no hay azeótropo, ni la curva de equilibrio se acerca a la línea de 45° por lo que no hay tangencia. Por tanto buscamos obtener el valor  $q$ , este está dado por la Ecuación (IV.33) del Marco Teórico:

$$q = \frac{H_G - H_F}{H_G - H_L}$$

Debemos calcular por tanto las entalpías de la alimentación como líquido saturado ( $H_L$ ), como vapor saturado ( $H_G$ ) y la entalpía de la alimentación tal y como se ingresa a la torre ( $H_F$ ). Como se explica en el Marco Teórico en la Ecuación (IV.11), la entalpía del líquido se calcula mediante:

$$H_L = C_{pL,m}(T_{sat} - T_{ref}) + \Delta H_S$$

En este caso no se toma en cuenta la entalpía de mezclado ya que una de las suposiciones del método McCabe-Thiele es que no hay efecto de calor de mezclado. Para calcular la entalpía del vapor saturado se tiene:

$$H_G = H_L + \lambda_{sol}$$

Por ello iniciamos primero calculando  $H_L$  y necesitamos la capacidad calorífica específica promedio de la alimentación. Los datos para las capacidades caloríficas y los calores latentes se obtienen del Manual Perry tal y como se indica en la página 139. Para el Disulfuro de carbono la capacidad calorífica se obtiene a la temperatura de referencia ( $T_{Ref} = T_{sat_D}$ ) mediante:

$$C_{pL} = C_1 + C_2T + C_3T^2 + C_4T^3 + C_5T^4$$

$$C_{pL,DdC} = 85600 - 122.0(319.8501) + 0.5605(319.8501)^2 - 0.00145(319.8501)^3 \\ + 0.00002008(319.8501)^4$$

$$C_{pL,DdC} = 77488.85 \frac{\text{J}}{\text{kmol K}} * \frac{1 \text{ kmol}}{1000 \text{ mol}} = 77.4888 \frac{\text{J}}{\text{mol K}}$$

Para el Tetracloruro de carbono obtenemos la capacidad calorífica mediante:

$$C_{pL,TdC} = -752700 + 8966.1(319.8501) - 30.3940(319.8501)^2 - 0.03446(319.8501)^3$$

$$C_{pL,TdC} = 133276.7425 \frac{\text{J}}{\text{kmol K}} * \frac{1 \text{ kmol}}{1000 \text{ mol}} = 133.2767 \frac{\text{J}}{\text{mol K}}$$

La capacidad calorífica promedio de la solución se obtiene utilizando la Ecuación (IV.12) descrita en el Marco Teórico:

$$C_{pL,m} = x_F * C_{pL,DdC} + (1 - x_F) * C_{pL,TdC}$$

$$C_{pL,m} = 0.66891 * 77.4888 \frac{\text{J}}{\text{mol K}} + (1 - 0.66891) * 133.2767 \frac{\text{J}}{\text{mol K}}$$

$$C_{pL,m} = 95.959415 \frac{\text{J}}{\text{mol K}}$$

Calculamos ahora la entalpía de la alimentación como líquido saturado ( $H_L$ ), sabiendo que la temperatura de referencia es la temperatura de saturación del destilado:

$$H_L = 95.959415 \frac{\text{J}}{\text{mol K}} (325.3310 \text{ K} - 319.8501 \text{ K})$$

$$H_L = 525.9439 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$$

Para obtener la entalpía de la alimentación como vapor saturado se debe obtener el calor latente de la solución. Calculamos primero  $\lambda$  para cada compuesto mediante la Ecuación (IV.16) del Marco teórico. Para el disulfuro de carbono se tiene:

$$T_{R,DdC} = \frac{T_{sat_F}}{T_c} = \frac{325.3310}{552.00} = 0.58937$$

$$\lambda = C_1(1 - T_r)^{C_2 + C_3T_r + C_4T_r^2 + C_5T_r^3}$$

$$\lambda_{DdC} = 34960000(1 - 0.58937)^{0.29860}$$

$$\lambda_{\text{DdC}} = 26800802 \frac{\text{J}}{\text{kmol}} * \frac{1 \text{ kmol}}{1000 \text{ mol}} = 26800.802 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$$

Para el tetracloruro de carbono:

$$T_{R,\text{TdC}} = \frac{325.3310}{556.35} = 0.58476$$

$$\lambda_{\text{TdC}} = 43252000(1 - 0.58476)^{0.37688}$$

$$\lambda_{\text{TdC}} = 31056377.01 \frac{\text{J}}{\text{kmol}} * \frac{1 \text{ kmol}}{1000 \text{ mol}} = 31056.377 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$$

La entalpía del vapor está dada por:

$$\lambda_{\text{sol}} = x_F \lambda_{\text{DdC}} + (1 - x_F) \lambda_{\text{TdC}}$$

$$\lambda_{\text{sol}} = 0.66891 * 26800.802 \frac{\text{J}}{\text{mol}} + (1 - 0.66891) * 31056.377 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$$

$$\lambda_{\text{sol}} = 28209.78 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$$

$$H_G = H_L + \lambda_{\text{sol}}$$

$$H_G = 525.9439 \frac{\text{J}}{\text{mol}} + 28209.78 \frac{\text{J}}{\text{mol}} = 28735.72 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$$

La alimentación se realiza como mezcla de líquido y vapor. Sabemos que el 30 % de la alimentación es vapor saturado y el 70 % es líquido saturado. Por ello la entalpía de la alimentación tal y como entra a la columna es:

$$H_F = 0.30 * H_G + 0.70 * H_L$$

$$H_F = 0.30 * 28735.72 \frac{\text{J}}{\text{mol}} + 0.70 * 525.9439 \frac{\text{J}}{\text{mol}} = 8988.8767 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$$

Ahora calculando el valor  $q$  obtenemos:

$$q = \frac{H_G - H_F}{H_G - H_L} = \frac{28735.72 - 8988.8767}{28735.72 - 525.9439} = 0.699998 \approx 0.7$$

La línea  $q$  está dada por la Ecuación (IV.35) del Marco Teórico:

$$y = \frac{q}{q-1}x - \frac{z_F}{q-1}$$

Sabemos que podemos iniciar a dibujar esta línea en  $z_F$  ya que atraviesa este punto, por tanto no necesitamos dibujarla toda ni encontrar el valor de su intercepto. Basta solamente encontrar la pendiente:

$$m_q = \frac{q}{q-1} = \frac{0.699998}{0.699998 - 1} = -2.333$$

Este valor de pendiente nos indica que si avanzamos 1 unidad en  $x$  bajamos 2.33 unidades en  $y$ , o también, si retrocedemos 1 unidad en  $x$  subimos 2.33 unidades en  $y$ .

Se diagrama ahora esta información en un gráfico  $x$  vs.  $y$  de forma manual<sup>6</sup>. Dibujamos primero líneas verticales en  $x_W$ ,  $x_F$  y  $x_D$ , tal y como lo indica el procedimiento presentado en el Marco Teórico

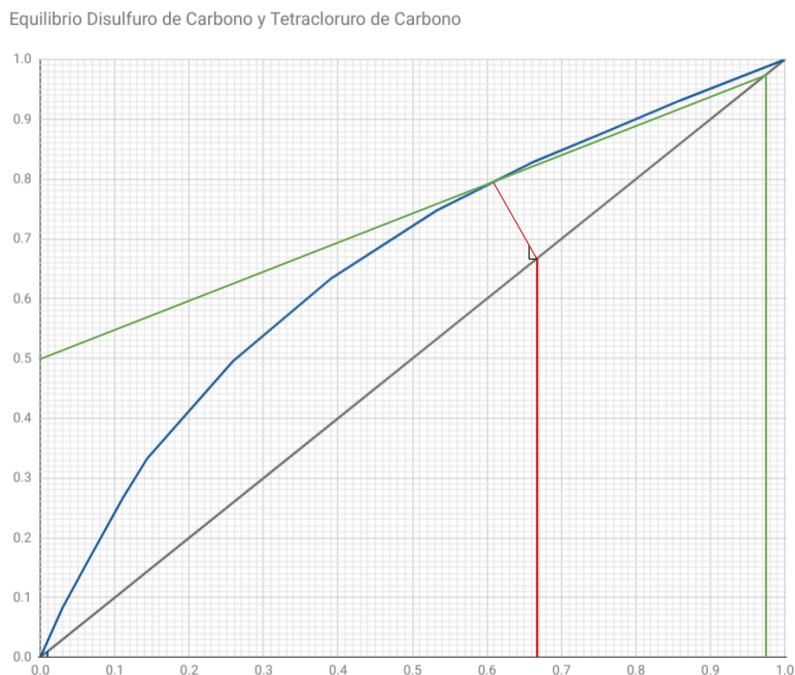
<sup>6</sup>Podemos imprimir el diagrama y dibujar a mano o utilizar una herramienta de dibujo para diagramar sobre la gráfica. Para esta resolución se utilizó esta última opción

en la página 25. También dibujamos la línea  $q$  tomando en cuenta su pendiente. La extendemos desde  $(x_f, x_f)$  hasta que toque la curva de equilibrio. Luego dibujamos la línea de enriquecimiento para  $R_m$  iniciando en  $(x_D, x_D)$  y pasando por el cruce de la línea  $q$  con el equilibrio. Como se puede apreciar en la Figura XIII.52 esta línea cruza el eje  $y$  cerca de  $y = 0.5$ , es decir este es nuestro intercepto. Con este intercepto calculamos el reflujo mínimo mediante:

$$R_m = \frac{x_D}{y_{\text{intercepto}}} - 1 = \frac{0.97461}{0.5} - 1 = 0.94922$$

Por tanto se completa con esto la respuesta para el **Inciso 2**.

Figura XIII.52: Determinación del reflujo mínimo ( $R_m$ )



El **Inciso 3** nos pide que calculemos el número mínimo de platos ideales. En la Figura XIII.53 se realizó el diagrama en escalera desde  $(x_D, x_D)$  hacia la izquierda y se obtuvo que se requieren 9 etapas cuando se opera a reflujo total.

El **Inciso 4** nos solicita el número de platos o etapas teóricas ( $N_p$ ) y la etapa de alimentación para una relación de reflujo del doble del mínimo. La nueva relación de reflujo sería entonces:

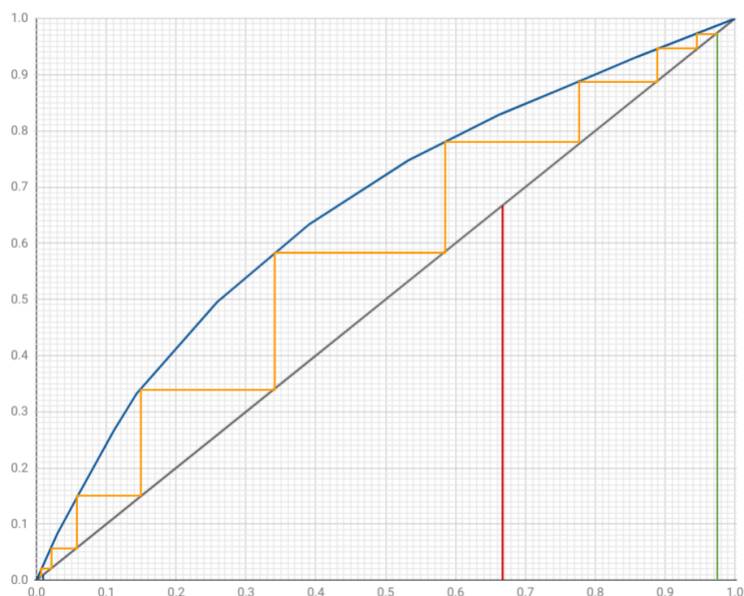
$$R = 2R_m = 2 * 0.949 = 1.898$$

El nuevo intercepto está dado por:

$$y_{\text{intercepto}} = \frac{x_D}{R + 1} = \frac{0.97461}{1.898 + 1} = 0.3363$$

Dibujamos la nueva línea de enriquecimiento desde  $(0, 0.3363)$  hasta  $(x_D, x_D)$  en la Figura XIII.55. En el cruce de esta línea con la línea  $q$  iniciamos la línea de la sección de agotamiento, la cual termina en  $(x_W, x_W)$ . Ahora graficamos las etapas por sobre las líneas de operación, iniciando en  $(x_D, x_D)$ , al pasar por la línea  $q$  cambiamos de la línea de enriquecimiento (en amarillo)

Figura XIII.53: Número de etapas mínimas requeridas



a la línea de agotamiento (en azul) hasta llegar a  $(x_W, x_W)$ . Al contar escalones encontramos que se lograron dibujar 13 etapas. La alimentación se realiza en el escalón en el cual se encuentran la línea  $q$  con las dos líneas de operación, en este caso en el 7o. escalón numerando de arriba hacia abajo.

El **Inciso 4** pide la eficiencia global del plato. Esta se calculó ya anteriormente y lo podemos encontrar en la página 148, por ello solamente importamos ese dato y la eficiencia a utilizar es:

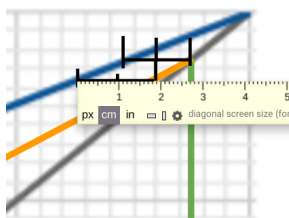
$$E_{oc} = 0.487$$

Hacemos el diagrama asumiendo que se trata de una eficiencia del líquido, es decir limitando los escalones horizontalmente tal y como se explica en la sección *Eficiencia de las etapas* (p. 26) del Marco Teórico. Como se muestra en la Figura XIII.54 dibujamos primero una línea horizontal entre la línea de enriquecimiento y el equilibrio. Medimos luego la longitud de dicha línea<sup>7</sup>, obtenemos luego la nueva longitud mediante:

$$L_2 = E * L_1$$

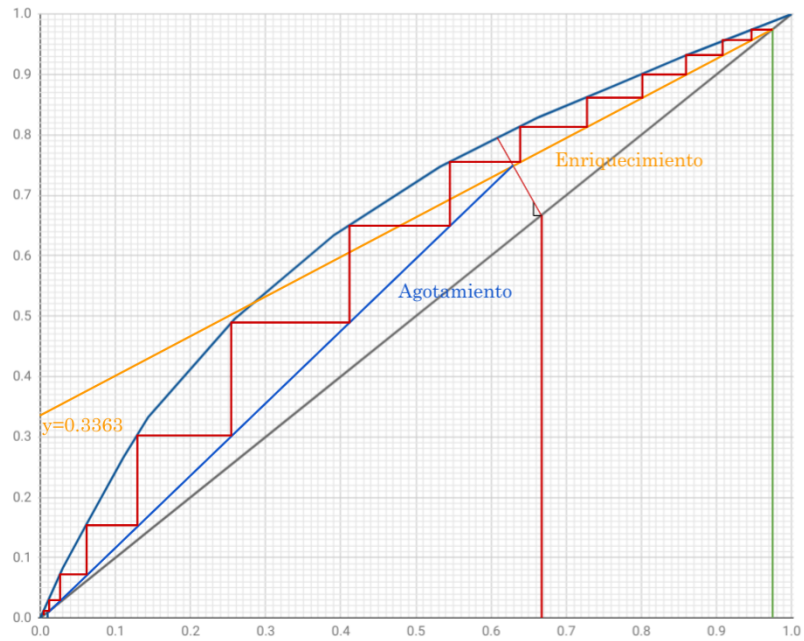
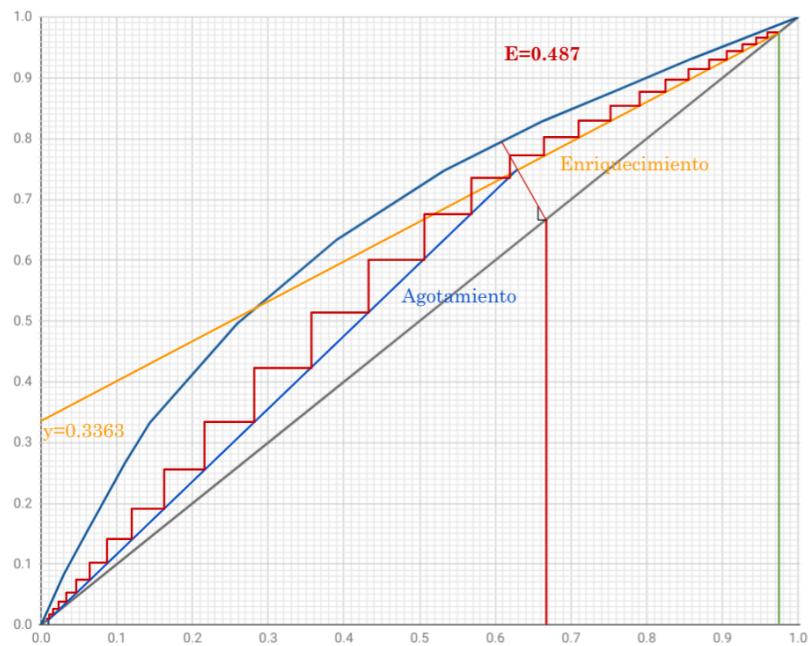
Medimos esta nueva longitud que será menor que la inicial, y en este punto diagramamos una línea vertical hacia la línea de operación y repetimos el procedimiento para el siguiente escalón. Se muestra en la Figura XIII.56 que con esta eficiencia se requieren 28 etapas y se alimenta en la etapa 12.

Figura XIII.54: Medición de los escalones tomando en cuenta la eficiencia



<sup>7</sup>Podemos utilizar una regla por encima de nuestra pantalla o una regla digital, como se realizó en este caso. Se debe de cuidar de no modificar las proporciones entre mediciones.

Figura XIII.55: Platos requeridos para la destilación

Figura XIII.56: Platos requeridos para la destilación con  $E = 0.487$ 

El **Inciso 6** nos solicita  $H_F$ ,  $H_W$  y  $H_{G_1}$ . Nos pide calcular también la carga térmica del condensador ( $Q_c$ ) y del rehervidor ( $Q_b$ ).  $H_F$  ya lo habíamos calculado:

$$H_F = 8988.8767 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$$

$H_D$  toma el valor de cero. Se trata de un líquido saturado<sup>8</sup> por tanto  $H_D = C_{pL,m}(T_{sat_D} - T_{ref})$ . Sin embargo, como la temperatura de referencia es la del destilado, la entalpía es 0.

Para calcular  $H_{G_1}$  recordemos que este es el vapor saturado que entra al condensador, después de condensado se convierte en el destilado saturado. Se obtiene mediante:

$$H_{G_1} = H_D + \lambda_{sol}$$

Requerimos calcular únicamente el calor latente de la solución a la composición  $x_D = x_{G_1}$ . Calculamos primero  $\lambda$  para el Disulfuro de Carbono:

$$T_{r,DdC} = \frac{T_{sat_{G_1}}}{T_C} = \frac{319.8501}{552.00} = 0.57944$$

$$\lambda_{DdC} = 34960000(1 - 0.57944)^{0.2986} = 26992734.92 \frac{\text{J}}{\text{kmol}} * \frac{1 \text{ kmol}}{1000 \text{ mol}} = 26992.735 \frac{\text{J}}{\text{kmol}}$$

Luego, calculamos  $\lambda$  para el Tetracloruro de Carbono:

$$T_{r,TdC} = \frac{319.8501}{556.35} = 0.57491$$

$$\lambda_{TdC} = 43252000(1 - 0.57491)^{0.37688} = 31332050.51 \frac{\text{J}}{\text{kmol}} * \frac{1 \text{ kmol}}{1000 \text{ mol}} = 31332.05 \frac{\text{J}}{\text{kmol}}$$

El calor latente de la solución está dado por:

$$\lambda_{sol} = 0.97461 * 26992.735 \frac{\text{J}}{\text{mol}} + (1 - 0.97461) * 31332.05 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$$

$$\lambda_{sol} = 27102.91021 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$$

Entonces  $H_{G_1}$  es:

$$H_{G_1} = 0 \frac{\text{J}}{\text{mol}} + 27102.91021 \frac{\text{J}}{\text{mol}} = 27102.91021 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$$

Ahora calculamos la entalpía del residuo ( $H_W$ ). Este es un líquido saturado por lo que  $H_W = C_{pL,m}(T_{sat_W} - T_{ref})$ .  $W$  tiene la composición  $x_W = 0.01005$ .

$$C_{pL,m} = 0.01005 * 77.4888 \frac{\text{J}}{\text{mol K}} + (1 - 0.01005) * 133.2767 \frac{\text{J}}{\text{mol K}}$$

$$C_{pL,m} = 132.715335 \frac{\text{J}}{\text{mol K}}$$

$$H_W = 132.715335 \frac{\text{J}}{\text{mol K}} (349.2388 \text{ K} - 319.8501 \text{ K}) = 3900.3312 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$$

Ahora,  $Q_c$  está dado por la Ecuación (IV.19) del Marco teórico:

$$Q_c = D(R + 1)(H_{G_1} - H_D)$$

---

<sup>8</sup>Se utiliza un condensador total

Tenemos las entalpías en J/mol pero  $D$  está en kg/h por ello convertimos  $D$  a mol/h utilizando las fracciones masa:

$$D = 2095.2381 \frac{\text{kg}}{\text{h}} * \left( \frac{0.95}{76.135 \text{kg/kmol}} + \frac{1 - 0.95}{153.82 \text{kg/kmol}} \right) * \frac{1000 \text{mol}}{1 \text{kmol}}$$

$$D = 26825.10435 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

Por tanto, para  $R = 1.898$  según la especificación del problema  $Q_c$  es:

$$Q_c = 26825.10435 \frac{\text{mol}}{\text{h}} (1.898 + 1) (27102.91021 \frac{\text{J}}{\text{mol}} - 0 \frac{\text{J}}{\text{mol}})$$

$$Q_c = 2106957267 \frac{\text{J}}{\text{h}}$$

Finalmente  $Q_b$  se obtiene de la Ecuación (IV.22) del Marco Teórico:

$$FH_F + Q_b = DH_D + WH_W + Q_c + Q_T$$

En este caso el problema no nos indica valores de pérdidas de calor  $Q_T$  por lo que se asumen igual a cero. Calculamos primero los demás flujos ( $F$  y  $W$ ) en moles por hora:

$$F = 4000 \frac{\text{kg}}{\text{h}} * \left( \frac{0.50}{76.135 \text{kg/kmol}} + \frac{1 - 0.50}{153.82 \text{kg/kmol}} \right) * \frac{1000 \text{mol}}{1 \text{kmol}}$$

$$F = 39271.33758 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

$$W = 1904.7619 \frac{\text{kg}}{\text{h}} * \left( \frac{0.005}{76.135 \text{kg/kmol}} + \frac{1 - 0.005}{153.82 \text{kg/kmol}} \right) * \frac{1000 \text{mol}}{1 \text{kmol}}$$

$$W = 12446.23326 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

Finalmente, la carga térmica del rehervidor ( $Q_b$ ) es:

$$Q_b = DH_D + WH_W + Q_c + Q_T - FH_F$$

$$Q_b = 26825.10435 \frac{\text{mol}}{\text{h}} * 0 \frac{\text{J}}{\text{mol}} + 12446.23326 \frac{\text{mol}}{\text{h}} * 3900.3312 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$$

$$+ 2106957267 \frac{\text{J}}{\text{h}} + 0 \frac{\text{J}}{\text{h}} - 39271.33758 \frac{\text{mol}}{\text{h}} * 8988.8767 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$$

$$Q_b = 1802496488 \frac{\text{J}}{\text{h}}$$

## XIV. ANEXO 2: FUNCIONES UTILIZADAS

A continuación se presentan algunas de las funciones utilizadas para la elaboración del simulador en una hoja de cálculo de Google. Toda la información presentada a continuación se obtuvo de la *Lista de funciones de Hojas de cálculo de Google* (Adielsson y col., s.f.). Se presentan separadas de acuerdo al tipo de función según la clasificación de Google.

### A. Analizador

#### **CONVERTIR**

Convierte un valor numérico a una unidad de medida diferente.

Ejemplos de uso:

```
CONVERTIR(5.1, "g", "kg")  
CONVERTIR(32, "C", "F")  
CONVERTIR(35.7, "in^2", "m^2")  
CONVERTIR(A1, A2, A3)
```

Sintaxis:

```
CONVERTIR(value, start_unit, end_unit)
```

En donde:

- **value**: valor numérico de **start\_unit** que se va a convertir en **end\_unit**.
- **start\_unit**: unidad de origen asignada actualmente a **value**.
- **end\_unit**: unidad de medida a la que se va a convertir **value**.

En la siguiente lista se muestran las conversiones de unidades disponibles por categoría:

- **Peso**: u, grain, g, ozm, lbm, stone, sg, cwt, uk\_cwt, ton, uk\_ton
- **Distancia**: ang, Picapt, pica, in, ft, yd, m, ell, mi, survey\_mi, Nmi, ly, parsec
- **Tiempo**: sec, min, hr, day, yr
- **Presión**: Pa, mmHg, Torr, psi, atm

- Fuerza: dyn, pond, N, lbf
- Energía: eV, e, J, flb, c, cal, BTU, Wh, HPh
- Potencia: W, PS, HP
- Magnetismo: ga, T
- Temperatura: C, F, K, Rank, Reau
- Volumen: ang<sup>3</sup>, Picapt<sup>3</sup>, tsp, tspm, tbs, in<sup>3</sup>, oz, cup, pt, uk\_pt, qt, l, uk\_qt, gal, uk\_gal, ft<sup>3</sup>, bushel, barrel, yd<sup>3</sup>, m<sup>3</sup>, MTON, GRT, mi<sup>3</sup>, Nmi<sup>3</sup>, ly<sup>3</sup>
- Área: ang<sup>2</sup>, Picapt<sup>2</sup>, in<sup>2</sup>, ft<sup>2</sup>, yd<sup>2</sup>, m<sup>2</sup>, ar, Morgen, uk\_acre, us\_acre, ha, mi<sup>2</sup>, Nmi<sup>2</sup>, ly<sup>2</sup>
- Información: bit, byte
- Velocidad: m/hr, mph, kn, admkn, m/s

## B. Búsqueda

### BUSCARV

Búsqueda vertical. Busca un valor en la primera columna de un intervalo y ofrece el valor de una celda específica en la fila encontrada.

Ejemplo de uso:

```
BUSCARV(10003; A2:B26; 2; FALSE)
```

Sintaxis:

```
BUSCARV(valor_búsqueda; intervalo; índice; [está_ordenado])
```

En donde:

- **valor\_búsqueda**: valor que quieres buscar. Por ejemplo, 42, "Gatos" o I24.
- **intervalo**: intervalo de la búsqueda. El valor especificado en el argumento **valor\_búsqueda** se busca en la primera columna del intervalo.
- **índice**: índice de la columna del valor que se debe devolver, teniendo en cuenta que la primera columna de intervalo tiene asignado el número 1.  
Si el valor de **índice** no está comprendido entre 1 y el número de columnas de intervalo, se devuelve #¡VALOR!.
- **está\_ordenado** [VERDADERO de forma predeterminada]: indica si la columna en la que se quiere buscar (la primera columna del intervalo especificado) está ordenada.

### COINCIDIR

Ofrece la posición relativa de un elemento en un intervalo que coincide con un valor especificado.

Ejemplo de uso:

```
COINCIDIR("Domingo";A2:A9;0)
COINCIDIR(FECHA(2012;1;1);A2:F2)
```

Sintaxis:

```
COINCIDIR(valor_búsqueda; intervalo; tipo_búsqueda)
```

En donde:

- **valor\_búsqueda:** Valor que se desea buscar. Por ejemplo, 42, "Gatos" o I24.
- **intervalo:** Matriz unidimensional en la que se desea buscar.  
Si se utiliza un intervalo con ancho y alto mayores que 1, COINCIDIR devuelve #N/A!
- **tipo\_búsqueda** - [OPCIONAL - 1 de forma predeterminada]: Modo de búsqueda.
  - El valor predeterminado, 1, hace que COINCIDIR asuma que el intervalo está ordenado de forma ascendente y devuelva el valor más alto que sea menor o igual que **valor\_búsqueda**.
  - 0 indica la coincidencia exacta y es obligatorio si intervalo no está ordenado.
  - -1 hace que COINCIDIR asuma que el intervalo está ordenado de forma descendente y devuelva el valor más pequeño que sea mayor o igual que **valor\_búsqueda**.

## DESREF

Ofrece una referencia de intervalo que cambió un número específico de filas y columnas a partir de una referencia de celda inicial.

Ejemplo de uso:

```
DESREF(A2;3;4;2;2)
DESREF(A2;1;1)
```

Sintaxis:

```
DESREF(referencia_celda; filas_desplazamiento; columnas_desplazamiento;
[alto]; [ancho])
```

En donde:

- **referencia\_celda:** Punto de inicio a partir del cual se cuenta el desplazamiento de filas y columnas.
- **filas\_desplazamiento:** Número de filas que se desea desplazar. Debe ser un entero, pero puede ser negativo. Si se indica un valor decimal, la parte decimal se trunca.
- **columnas\_desplazamiento:** Número de columnas que se desea desplazar. Debe ser un entero, pero puede ser negativo. Si se indica un valor decimal, la parte decimal se trunca.
- **alto** - [OPCIONAL]: Altura del intervalo que se desea devolver, empezando en el destino desplazado. Se ignora a menos que DESREF se utilice en una fórmula de matriz.
- **ancho** - [OPCIONAL]: Ancho del intervalo que se desea devolver, empezando en el destino desplazado. Se ignora a menos que DESREF se utilice en una fórmula de matriz.

**FILAS**

Ofrece el número de filas de una matriz o intervalo determinado.

Ejemplo de uso:

```
FILAS(A9:A62)

FILAS({1;2;3;4;5})
```

Sintaxis:

```
FILAS(intervalo)
```

En donde:

- **intervalo**: Intervalo en el que se desea realizar el recuento de filas.

**INDICE**

Ofrece el contenido de una celda, especificado por los índices de número de fila y de columna.

Ejemplo de uso:

```
INDICE(A1:C20; 5; 1; 1)
```

Sintaxis:

```
INDICE(referencia; fila; columna)
```

En donde:

- **referencia**: Matriz de celdas por el que desplazarse.
- **fila**: Número de filas que se desea desplazar.
- **columna**: Número de columnas que se desea desplazar.

**INDIRECTO**

Ofrece una referencia de celda especificada por una cadena.

Ejemplo de uso:

```
INDIRECTO("Hoja2!"&B10)

INDIRECTO("A2")

INDIRECTO("R2C3", FALSO)
```

Sintaxis:

```
INDIRECTO(referencia_celda_como_cadena, [es_notación_A1])
```

En donde:

- **referencia\_celda\_como\_cadena**: Referencia de celda, escrita como cadena entrecomillada.
- **es\_notación\_A1** - [OPCIONAL - VERDADERO de forma predeterminada]: Indica si la referencia de celda está en la notación A1 o en la notación R1C1. Este argumento solo es compatible con la nueva versión de Hojas de cálculo de Google.

## C. Estadística

### CONTAR

Ofrece el recuento de valores numéricos de un conjunto de datos.

Ejemplo de uso:

```
CONTAR(A2:A100;B2:B100;4;26)
```

```
CONTAR(1;2;3;4;5;C6:C20)
```

Sintaxis:

```
CONTAR(valor1; [valor2;...])
```

En donde:

- **valor1**: Primer valor o intervalo que se debe tener en cuenta al contar.
- **valor2, ... - [OPCIONAL]**: Valores o intervalos adicionales que se deben tener en cuenta al contar.

### INTERSECCION.EJE

Calcula el valor  $y$  en el que la línea que resulta de la regresión lineal de un conjunto de datos cruzará el eje  $y$  ( $x = 0$ ).

Ejemplo de uso:

```
INTERSECCION.EJE(A2:A100;B2:B100)
```

Sintaxis:

```
INTERSECCION.EJE(datos_y; datos_x)
```

En donde:

- **datos\_y**: Intervalo que representa la matriz de datos dependientes.
- **datos\_x**: Intervalo que representa la matriz de datos independiente

### PENDIENTE

Calcula la pendiente de la línea que resulta de la regresión lineal de un conjunto de datos.

Ejemplo de uso:

```
PENDIENTE(A2:A100;B2:B100)
```

Sintaxis:

```
PENDIENTE(datos_y; datos_x)
```

En donde:

- **datos\_y**: Intervalo que representa la matriz de datos dependientes.
- **datos\_x**: Intervalo que representa la matriz de datos independientes.

### PRONOSTICO

Calcula el valor  $y$  esperado para un valor  $x$  especificado basándose en la regresión lineal de un conjunto de datos.

Ejemplo de uso:

```
PRONOSTICO(A1;A2:A100;B2:B100)
```

Sintaxis:

```
PRONOSTICO(x; datos_y; datos_x)
```

En donde:

- **x**: Valor del eje  $x$  que se desea pronosticar.
- **datos\_y**: Intervalo que representa la matriz de datos dependientes.
- **datos\_x**: Intervalo que representa la matriz de datos independientes.

## D. Google

### IMAGE

Inserta una imagen dentro de una celda.

Ejemplo de uso:

```
IMAGE("https://www.google.com/images/srpr/logo3w.png")
IMAGE(A2;2)
IMAGE(A2;4;120;200)
```

Sintaxis:

```
IMAGE(url; [modo]; [alto]; [ancho])
```

En donde:

- **url**: URL de la imagen, incluido el protocolo (por ejemplo, http://). El valor de url debe ir entre comillas o ser una referencia a una celda que contenga el texto adecuado.
- **modo** - [OPCIONAL - 1 de forma predeterminada]: Modo de ajuste de tamaño de la imagen.
  - 1 cambia el tamaño de la imagen para que quepa dentro de la celda manteniendo la relación de aspecto.

- 2 estira o comprime la imagen para que quepa dentro de la celda sin tener en cuenta la relación de aspecto.
- 3 mantiene el tamaño original de la imagen, lo cual puede provocar que se recorte.
- 4 permite especificar un tamaño personalizado.

No hay ningún modo en el cual la celda cambie de tamaño para ajustarse a la imagen.

- **alto** - [OPCIONAL]: Altura de la imagen en píxeles. modo debe valer 4 para establecer una altura personalizada.
- **ancho** - [OPCIONAL ]: El ancho de la imagen en píxeles. modo debe valer 4 para establecer un ancho personalizado.

## E. Información

### CELDA

Devuelve la información solicitada sobre la celda especificada.

Ejemplo de uso:

```
CELL("tipo", C2)

CELL("ancho", A10)
```

Sintaxis:

```
CELDA(tipo_información; referencia)
```

En donde:

- **tipo\_información**: tipo de información solicitada. Puede ser uno de los siguientes valores:
  - **"dirección"**: devuelve una referencia absoluta como texto sin formato de la celda superior izquierda de referencia.
  - **"columna"**: devuelve el número de columna de la celda de referencia.
  - **"contenido"**: devuelve el valor de la celda superior izquierda de referencia.
  - **"prefijo"**: devuelve un valor de texto en función de la alineación horizontal del texto de la celda de referencia. De este modo, devuelve un apóstrofo ( ' ) si la celda contiene texto alineado a la izquierda, comillas ( " ) si está alineado a la derecha, un acento circunflejo ( ^ ) si está centrado y aparece vacío para el resto de las opciones.
  - **"fila"**: devuelve el número de fila de la celda superior izquierda de referencia.
  - **"tipo"**: devuelve el tipo de datos de la celda de referencia. Se devuelven los siguientes valores: "b" para las celdas vacías, "l" (del inglés "label", (etiqueta)) si la celda contiene texto sin formato y "v" (de valor) si la celda contiene otro tipo de datos.
  - **"ancho"**: devuelve el ancho de columna expresado en el número de caracteres que caben en la celda proporcionada en referencia. El número obtenido se determina en función del ancho del carácter cero (0) con el tamaño de fuente predeterminado.
- **referencia**: referencia a la celda.

**ESBLANCO**

Comprueba si la celda de referencia está vacía. Devuelve **TRUE** si valor está vacío o hace referencia a una celda vacía y **FALSE** si contiene datos o hace referencia a datos.

Ejemplo de uso:

```
ESBLANCO(A2)

SI(ESBLANCO(B1),,A1/B1)
```

Sintaxis:

```
ESBLANCO(valor)
```

En donde:

- **valor**: hace referencia a la celda que se comprobará si está vacía.

**ESNUMERO**

Comprueba si un valor es un número. Devuelve **VERDADERO** si esto es un número o una referencia a una celda que contiene un valor numérico y **FALSO** en caso contrario.

Ejemplo de uso:

```
ESNUMERO(A2)

ESNUMERO(4)
```

Sintaxis:

```
ESNUMERO(valor)
```

En donde:

- **valor**: Valor que se desea comprobar si es un número.

**F. Lógica****IFS**

Comprueba si se cumplen una o varias condiciones y devuelve un valor que corresponde a la primera condición verdadera. Si ninguna de las condiciones es verdadera la función devolverá error. Puede sustituir a varias instrucciones **SI()** anidadas y es más fácil de leer con varias condiciones.

Ejemplo de uso:

```
=IFS(D5<60,"F",D5<70,"D",D5<80,"C",D5<90,"B",D5>=90,"A")

=IFS(D23="Tsat D",I46,D23="Tsat W",I39,D23="Personalizado",G23)
```

Sintaxis:

```
=IFS (expresión_lógica1, valor_si_true1, [expresión_lógica2,
valor_si_true2], ...)
```

En donde:

- **expresión\_lógica1**: Expresión o referencia a una celda que contenga una expresión que presente un valor lógico, esto es, VERDADERO o FALSO.
- **valor\_si\_true1**: Valor que devuelve la función si **expresión\_lógica1** es VERDADERO.
- **expresión\_lógica2**: Segunda expresión o referencia a una celda que contenga una expresión que represente un valor lógico.
- **valor\_si\_true2**: Valor que devuelve la función si **expresión\_lógica2** es VERDADERO.
- Se pueden añadir más parejas de expresiones a comprobar con su respectivo valor a devolver en caso de ser verdadera la expresión.

## SI

Ofrece un valor si una expresión lógica es VERDADERO y otro si es FALSO.

Ejemplo de uso:

```
SI(A2 = "foo";"A2 es foo")

SI(A2,"A2 era verdadero";"A2 era falso")

SI(VERDADERO;4;5)
```

Sintaxis:

```
SI(expresión_lógica; valor_si_true; valor_si_false)
```

En donde:

- **expresión\_lógica**: Expresión o referencia a una celda que contenga una expresión que presente un valor lógico, esto es, VERDADERO o FALSO.
- **valor\_si\_true**: Valor que devuelve la función si **expresión\_lógica** es VERDADERO.
- **valor\_si\_false** - [OPCIONAL - vacío de forma predeterminada]: Valor que devuelve la función si **expresión\_lógica** es FALSO.

## Y

Ofrece el resultado VERDADERO si todos los argumentos especificados son verdaderos desde el punto de vista lógico, y FALSO si alguno de los argumentos es falso.

Ejemplo de uso:

```
Y(A2 = "foo"; A3 = "bar")

Y(VERDADERO;FALSO;VERDADERO)

Y(A1:A10;B1:B10)

Y(0;1;2;3)
```

Sintaxis:

```
Y(expresión_lógica1, [expresión_lógica2,...])
```

En donde:

- **expresión\_lógica1**: Expresión o referencia a una celda que contiene una expresión que representa un valor lógico, esto es, VERDADERO o FALSO, o una expresión que se pueda transformar en un valor lógico.
- **expresión\_lógica2; ... - [ OPCIONAL ]**: Expresiones adicionales o referencias adicionales a celdas que contienen expresiones que representan valores lógicos, esto es, VERDADERO o FALSO, o expresiones que se puedan transformar en valores lógicos.

## G. Matemáticas

### **ABS**

Ofrece el valor absoluto de un número.

Ejemplo de uso:

```
ABS(-2)
```

```
ABS(A2)
```

Sintaxis:

```
ABS(valor)
```

En donde:

- **valor**: número del que se va a devolver el valor absoluto.

### **CONTAR.SI**

Ofrece un recuento condicional dentro de un intervalo.

Ejemplo de uso:

```
CONTAR.SI(A1:A10;">20")
```

```
CONTAR.SI(A1:A10;"Pagado")
```

Sintaxis:

```
CONTAR.SI(intervalo; criterio)
```

En donde:

- **intervalo**: Intervalo en el que se desea probar el argumento criterio.
- **criterio**: Patrón o prueba que se desea aplicar a intervalo.

- Si intervalo contiene texto para comprobar, criterio debe ser una cadena. criterio puede contener caracteres comodín, incluido ? para que coincida con cualquier carácter o \* para que coincida con cero o más caracteres contiguos. Para buscar la coincidencia con un signo de interrogación o un asterisco de verdad, añádele como prefijo el carácter (^) (esto es, utiliza ~? y ~\*). Los criterios de cadena deben indicarse entre comillas. A continuación, cada celda de intervalo se compara con criterio buscando la igualdad (o la coincidencia, si se utilizan caracteres comodín).
- Si intervalo contiene números para comprobar, criterio debe ser una cadena o un número. Si se indica un número, cada celda de intervalo se compara buscando la igualdad con criterio. De lo contrario, criterio puede ser una cadena con un número (en cuyo caso también se busca la igualdad), o un número con cualquiera de los operadores siguientes como prefijo: =, >, >=, < o <=, los cuales comprueban si la celda del intervalo es igual que, mayor que, mayor o igual que, menor que o menor o igual que el valor del criterio respectivamente.

### EXP

Ofrece el número de Euler,  $e$  ( 2,718), elevado a una potencia.

Ejemplo de uso:

```
EXP(2)
```

```
EXP(A2)
```

Sintaxis:

```
EXP(exponente)
```

En donde:

- **exponente**: Exponente al que se desea elevar el número  $e$ .

### LOG10

Ofrece el logaritmo de un número en base 10.

Ejemplo de uso:

```
LOG10(100)
```

```
LOG10(A2)
```

Sintaxis:

```
LOG10(valor)
```

En donde:

- **valor**: Valor para el que se desea calcular el logaritmo en base 10. Debe ser positivo.

## H. Matriz

### ESTIMACION.LINEAL

Dados los datos parciales de una tendencia lineal, calcula varios parámetros sobre la tendencia lineal ideal mediante el método de "mínimos cuadrados".

Ejemplo de uso:

```
ESTIMACION.LINEAL(B2:B10;A2:A10)
ESTIMACION.LINEAL(B2:B10;A2:A10;0;VERDADERO)
```

Sintaxis:

```
ESTIMACION.LINEAL(datos_conocidos_y; [datos_conocidos_x; b; detallado])
```

En donde:

- **datos\_conocidos\_y**: Matriz o intervalo que contiene los valores dependientes ( $y$ ) conocidos, que se usan para ajustar una tendencia lineal ideal. Si es una matriz o un intervalo bidimensional, **datos\_conocidos\_x** debe tener las mismas dimensiones o se debe omitir. Si es una matriz o un intervalo unidimensional, **datos\_conocidos\_x** puede representar múltiples variables independientes en una matriz o un intervalo bidimensional. Esto es, si **datos\_conocidos\_y** es una sola fila, cada fila de **datos\_conocidos\_x** se interpreta como un valor independiente aparte y el comportamiento es análogo cuando **datos\_conocidos\_y** es una sola columna.
- **datos\_conocidos\_x** - [OPCIONAL - {1;2;3;...}]: Valores de las variables independientes que corresponden a **datos\_conocidos\_y**.
- **b** - [OPCIONAL - VERDADERO de forma predeterminada]: Dada una fórmula exponencial general como  $y = m * x + b$  para el ajuste de una curva, calcula  $b$  si es VERDADERO. Fuerza que  $b$  sea 0 y solo calcula los valores  $m$  si es FALSO, es decir, obliga a la curva ajustada a pasar por el origen.
- **detallado** - [OPCIONAL - FALSO de forma predeterminada]: Marca que indica si se deben ofrecer estadísticas de regresión adicionales o solo los coeficientes lineales y el punto de corte en el eje  $y$  (predeterminado). Si es VERDADERO, además del conjunto de coeficientes lineales correspondientes a cada variable independiente y el corte en el eje  $y$ , ESTIMACION.LINEAL devuelve:
  - El error estándar de cada coeficiente y del punto de corte
  - El coeficiente de determinación (entre 0 y 1, donde 1 indica una correlación perfecta)
  - El error estándar de los valores de las variables dependientes
  - La estadística F, o valor observado F, que indica si la relación observada entre las variables dependientes e independientes es más aleatoria que lineal
  - Los grados de libertad, útiles para buscar valores estadísticos F en una tabla de referencia para estimar el nivel de confianza
  - La suma de cuadrados de la regresión
  - La suma de cuadrados residual

### MINVERSA

Ofrece el inverso multiplicativo de una matriz cuadrada especificado como una matriz o un intervalo.

Ejemplo de uso:

```
MINVERSA(A1:D4)
```

```
MINVERSA({1,2,3,4;5,6,7,8;9,10,11,12;13,14,15,16})
```

Sintaxis:

```
MINVERSA(matriz_cuadrada)
```

En donde:

- **matriz\_cuadrada**: Matriz o intervalo con el mismo número de filas y columnas que representa la matriz cuyo inverso multiplicativo se desea calcular.

## MMULT

Calcula la matriz que resulta del producto de dos matrices especificadas como matrices o intervalos.

Ejemplo de uso:

```
MMULT(A1:B3;C1:F2)
```

```
MMULT({1,2,3;4,5,6};{7;8;9})
```

Sintaxis:

```
MMULT(matriz1; matriz2)
```

En donde:

- **matriz1**: Primera matriz de la multiplicación de matrices, representada como una matriz o un intervalo.
- **matriz2**: Segunda matriz de la multiplicación de matrices, representada como una matriz o un intervalo.

## I. Texto

### CONCATENAR

Concatena cadenas.

Ejemplo de uso:

```
CONCATENAR("Super";"mercado")
```

```
CONCATENAR(A1;A2;A3)
```

```
CONCATENAR(A2:B7)
```

Sintaxis:

```
CONCATENAR(cadena1, [cadena2, ...])
```

En donde:

- **cadena1**: Cadena inicial.
- **cadena2, ... - [OPCIONAL]**: Cadenas adicionales para concatenar en orden.

## XV. ANEXO 3: EXPERIMENTACIÓN

### A. Procedimientos realizados para la experimentación en el Laboratorio de Operaciones Unitarias

#### 1. Procedimientos importantes para a la experimentación

##### a. Preparación de la solución y llenado del calderín

1. Verificar que las dos cubetas de 40 L y la cubetas de 20 L se encuentras limpias.
2. En cada cubeta de 40L añadir 25 L de agua filtrada.
3. Con la cubeta de 20 L medir 5 L del alcohol a utilizar y añadirlo a una cubeta de 40 L.
4. Volver a medir 5 L de alcohol y añadirlo a la otra cubeta
5. Agitar la solución en cada una de las cubetas.
6. Con ayuda de una llave inglesa retirar el tapón roscado de la parte superior del calderín.
7. Con ayuda del encargado de laboratorio y otra persona más subir ambas cubetas a la plataforma que se encuentra sobre el calderín.
8. Para crear un sifón con el cual pueda llenarse el calderín dos personas deben tomar cada una un extremo de una manguera corta. Una persona debe estar abajo cerca del calderín mientras que otra persona debe estar sobre la plataforma al lado de las cubetas.
9. Con ayuda de un vaso de precipitado o *beaker* la persona de la plataforma debe ir agregando líquido a la manguera hasta llenarla.
10. La persona de abajo debe mantener en alto su extremo de la manguera y cuando el nivel del líquido llegue a su extremo debe taparlo para evitar que se salga el líquido.
11. Una vez llena la manguera completamente se debe introducir, simultáneamente, un extremo de la manguera en el líquido de una de las cubetas y el otro extremo en el calderín.
12. Permitir que el líquido de la cubeta se traslade al calderín asegurándose que el extremo superior de la manguera esté siempre sumergido.
13. Antes de que se vacíe completamente dicha cubeta, verter el contenido de la segunda cubeta en la primera y dejar que se siga llenando el calderín.
14. Al disminuir el nivel del líquido inclinar la cubeta y mantener siempre sumergido el extremo de la manguera.
15. El remanente de líquido en la cubeta añadirlo al calderín utilizando un *beaker*.

16. Cerrar el calderín sellando el tapón rosca con ayuda de una llave inglesa.
17. Tomar tres tubos Eppendorf identificados como F1, F2 y F3 y tomar tres muestras de la solución alimentada abriendo la válvula V-019 del calderín<sup>1</sup>.

#### b. Encendido de la caldera

1. Ir al cuarto de calderas.
2. Encender los interruptores (disyuntores o *flipones*) ubicados en el tablero detrás del tanque de combustible.
3. Verificar que la línea del indicador de nivel de agua coincida con la línea de control de referencia para nivel bajo de agua. De no ser así, abrir las válvulas de purga de fondo para disminuir el nivel de agua hasta la marca.
4. Ubicar las dos válvulas rojas para usar el combustible y abrirlas.
5. Verificar que la válvula que permite el flujo de vapor al distribuidor de vapor o *manifold* esté cerrada por completo.
6. Encender la caldera presionando el interruptor del quemador.
7. Verificar la presencia de llama lo que indica que la caldera está encendida.
8. Esperar a que la temperatura se eleve hasta 95°C, este proceso dura cerca de 35 minutos.
9. Cuando la temperatura de la caldera sea de 95°C, abrir la llave superior celeste para ventear todo el aire presente, cerrar la válvula cuando inicie a salir vapor.
10. Abrir la válvula que permite el flujo del vapor al distribuidor de vapor.
11. Ir al distribuidor de vapor dentro del Laboratorio de Operaciones Unitarias.
12. Abrir la válvula que permite el paso del vapor hacia la columna de destilación.

#### c. Encendido de la torre de enfriamiento

1. Subir los dos disyuntores y el interruptor que se encuentran pegados en el lateral de la torre de enfriamiento.
2. Para encender el sistema de controles girar levemente la perilla roja en el exterior del panel, esta se separará un poco del panel.
3. Verificar que se encendió el sistema revisando que las luces de la válvula electrónica (color negro) se hayan encendido.
4. Encender la computadora de la torre de enfriamiento.
5. Abrir el software **Torre Enfriamiento V1R2**.
6. Preguntará si desea cargar el software, presionar **Yes** para continuar.
7. Preguntará si desea permitir hacer cambios en el equipo, presionar **Yes**.

---

<sup>1</sup>Se identificaron todas las válvulas presentes en la torre de destilación para la mejor comprensión de los procedimientos. Ver el diagrama de tuberías e instrumentación en el Anexo 4 para mayor información.

8. Seleccionar `Run Application>Iniciar proceso>Práctica de laboratorio>Siguiente`.
9. Presionar en la imagen del variador de frecuencia.
10. Seleccionar el modo de tiro forzado.
11. Ingresar un valor de 40 Hz.
12. Abrir la válvula de ingreso de agua caliente proveniente de la columna de destilación.
13. Abrir la válvula que permite el retorno de agua fría a la columna de destilación.
14. Verificar que la válvula de entrada de agua fría en la columna de Destilación esté abierta.
15. Encender la bomba presionando el botón verde que se encuentra en el lateral de la Torre de enfriamiento.
16. Verificar que la Torre de enfriamiento funciona correctamente observando en el vidrio lateral del equipo que exista flujo de agua.

#### d. Encendido de la columna de destilación

1. Abrir el panel que se encuentra al lado de la columna de destilación.
2. De izquierda a derecha subir los cuatro disyuntores del PLC.
3. Encender la computadora de la torre de destilación, verificar que está conectado el cable de red (cable negro) que conecta la computadora al panel.
4. Abrir el software `Torre_Dest_R4.cli` y seleccionar `Torre de destilación`.
5. Esperar un minuto y verificar que el sistema de control funciona y está indicando las temperaturas y presiones correspondientes.

## 2. Realización de una corrida de destilación

El procedimiento se realiza en el laboratorio de operaciones Unitarias y tiene una duración aproximada de 6 horas. Se realizó este procedimiento un total de cinco veces, dos veces con metanol y tres con etanol. Para cada alcohol, se realizó la solución alcohol-agua únicamente durante la primera corrida, en la segunda se reutiliza toda la solución remanente en el calderín de la corrida anterior y el alcohol destilado recuperado.

1. Si se está realizando por primera vez la corrida con un alcohol dado, se debe vaciar el calderín y los platos de la columna, la noche anterior, en caso de tener líquido acumulado y dejar abiertas las válvulas para dejar evaporar todo el remanente del alcohol anterior. Si es la segunda corrida con el mismo alcohol, no debe retirarse el líquido más bien añadir el destilado recuperado de la corrida anterior.
2. Levantar vapor en la caldera<sup>2</sup>.
3. Preparar la solución Alcohol-Agua a trabajar y añadirla al calderín<sup>3</sup> si se está realizando la primera corrida.
4. Revisar que las válvulas de destilado (V-011 y V-012), residuo (V-019) y alimentación (V-R01 a la V-R10) estén cerradas.

---

<sup>2</sup>Ver procedimiento *Encendido de la caldera*.

<sup>3</sup>Ver procedimiento *Preparación de la solución y llenado del calderín*.

5. Abrir las válvulas que permiten el paso de agua fría hacia el condensador (V-008 y V-010).
6. Poner a funcionar la torre de enfriamiento<sup>4</sup>.
7. Drenar las líneas de vapor de la columna de destilación abriendo la válvula V-003 hasta que salga todo el agua acumulada luego volver a cerrar bien la válvula.
8. Si se regulará el vapor desde la computadora se debe encender el compresor de aire.
9. Encender el sistema de control de la columna de destilación<sup>5</sup>.
10. Revisar el sistema de entrada de vapor a la columna, las válvulas V-004, V-005 y V-006 deben estar abiertas. Ubicar las válvulas V-001, V-002 y VS-001 que hasta el momento debieran estar cerradas.
11. Abrir la primera válvula de entrada de vapor (V-001). Usar guantes ya que la válvula puede estar caliente.
12. Abrir la válvula que se utilizará para regular la entrada de vapor, si se regulará de forma manual abrir levemente la válvula V-002, si se regulará desde la computadora se utiliza la válvula VS-001 dando clic en la imagen de la válvula y regulando desde la ventana para control de vapor en la computadora<sup>6</sup>.
13. Abrir las válvulas V-013 y V-014 para permitir que el líquido que condense regrese a la torre.
14. Si se está trabajando con reflujo total, abrir la válvula V-R01 manualmente o desde la computadora abrir la válvula VS-R01, ya que de este manera todo lo que condensa regresa al primer plato como reflujo.
15. Si se está trabajando con alimentación desde el tanque debe cerrarse la válvula V-013 y abrirse la válvula V-015 (o la válvula VS-005 desde la computadora)<sup>7</sup> y abrirse la válvula de alimentación según el plato en el que se desee alimentar. Otra opción con la que se ha trabajado es alimentar parte del condensado en el plato que se desee abriendo la válvula V-013 y la válvula de alimentación respectiva.
16. Al iniciar a evaporar la solución del calderín abrir por un momento la válvula de seguridad del condensador para ventear el aire presente en la torre.
17. Buscar mantener la presión constante, revisando que el manómetro PI-002 mantenga la presión entre 0.4-0.8 kg/cm<sup>2</sup>. Se buscará mantener la presión de vapor lo más estable posible, el valor dependerá del alcohol que se esté usando. Deberá controlarse que la temperatura de la torre en la parte superior sea mayor que el punto de ebullición del alcohol, pero no mucho mayor<sup>8</sup>.
18. Esperar a que las temperaturas y la presión de la torre estabilice.
19. Al estabilizar la torre tomar el primer conjunto de muestras<sup>9</sup>.
20. Anotar la presión atmosférica indicada por el barómetro de pared del Laboratorio de Operaciones Unitarias.

---

<sup>4</sup>Ver procedimiento *Encendido de la torre de enfriamiento*.

<sup>5</sup>Ver procedimiento *Encendido de la columna de destilación*.

<sup>6</sup>Por facilidad y para no encender el compresor de aire por una sola válvula se realizó el control del vapor utilizando la válvula manual (V-002). Al manipular esta válvula debe de tomarse en cuenta que estará caliente por lo que se necesitará protección para las manos, como por ejemplo un par de guantes de cuero.

<sup>7</sup>No se pudo trabajar con alimentación ya que la válvula VS-005 no estaba correctamente configurada y se encontraba totalmente abierta. Por esta razón el tanque de alimentación estaba desconectado del sistema y la tubería que proviene de éste estaba sellada.

<sup>8</sup>Recordar que el punto de ebullición de cada uno de los alcoholes es el siguiente: metanol: 64.7 °C y etanol: 78.37 °C.

<sup>9</sup>Ver procedimiento *Toma de muestras de líquido*.

21. Tomar una captura de pantalla del software en el que se indican las temperaturas de los platos.
22. Anotar la presión de vapor a la entrada del calderín.
23. Esperar 15 minutos, revisar las temperaturas de la torre y la presión verificando que el sistema sigue estable.
24. Tomar por segunda vez todas las muestras.
25. Anotar la presión atmosférica, tomar una captura de pantalla del software y anotar la presión de vapor.
26. Esperar 15 minutos antes de tomar muestras por tercera vez y anotar todas las condiciones del sistema.
27. Ir a la salida de condensados con un *beaker*, una probeta y un cronómetro y realizar el procedimiento *Medición de flujo de condensados*.
28. Cuando se han tomado todas las muestras se debe iniciar a recuperar destilado.
29. Colocar una cubeta de 20 L o una cubeta de 40 L en la salida del destilado y abrir las válvulas V-012 y V-011.
30. Seguir destilando y recuperando destilado por 30 minutos.
31. Al terminar de recuperar, apagar el vapor, cerrando las válvulas V-002 (o VS-001 si se está controlando desde la computadora) y la válvula V-001.
32. En el *manifold* o distribuidor de vapor, cerrar la válvula que distribuye hacia la columna de destilación.
33. Si no sé está utilizando vapor en otro equipo, apagar la caldera.
34. Esperar 15 minutos a que enfríe un poco el interior de la columna de destilación.
35. Apagar la torre de enfriamiento.
36. Cerrar las válvulas V-011 y V-012 y verificar que las demás válvulas estén cerradas.
37. Salir del software de la computadora y apagar el sistema de control de la torre de destilación.
38. Guardar todas las muestras tomadas en un lugar seguro para analizarlas posteriormente en el refractómetro.

### 3. Toma de muestras de líquido

Este proceso se realiza una vez se ha estabilizado la torre, para el presente trabajo se realizó un total de tres veces por cada destilación. Se identifican cada una de las tres tomas como: Toma A, Toma B y Toma C. Se identificaron previamente 36 tubos Eppendorf<sup>10</sup> con la letra de la toma (12 con cada letra) y el origen de la muestra, ya sea Destilado, residuo o el número de plato<sup>11</sup>.

1. Monitorear las temperaturas en la computadora.
2. Cuando las temperaturas en cada plato se hayan estabilizado iniciar a tomar muestras.
3. Tomar un *beaker* de 250 mL y purgar un poco de líquido en cada una de las válvulas de toma de muestra de líquido (V-M01 a la V-M10) para retirar los contaminantes que pudieran tener las tuberías de corridas anteriores. También purgar un poco de destilado y de residuo.

<sup>10</sup>En este caso se utilizaron Tubos Eppendorf de 1.5 mL ya que no se requiere mucho líquido para obtener el índice de refracción.

<sup>11</sup>La identificación se hizo de la siguiente manera: A Dest, A01, A 02,..., A 10 y A Resid.

4. Abrir V-012 por un momento y cerrarla, esto permitirá que salga destilado y se acumule en la tubería porque la válvula V-011 está cerrada.
5. Abrir la válvula V-011 y recibir en el tubo identificado como **A Dest** un poco de muestra y taparlo bien.
6. Proseguir con la muestra del plato 1, abriendo la válvula V-M01 por un momento y cerrarla bien nuevamente.
7. Repetir el procedimiento con cada plato (Válvulas V-M02 a V-M10) y finalizar tomando una muestra del residuo.
8. Monitorear nuevamente las temperaturas y asegurarse de que la torre siga operando de forma estable.

#### 4. Medición de flujo de condensados

1. Colocar un *beaker* a la salida de los condensados e inmediatamente iniciar a tomar el tiempo.
2. Parar el cronómetro inmediatamente se retira el recipiente.
3. Trasvasar el contenido a una probeta y medir el volumen obtenido.
4. Anotar el volumen de los condensados y el tiempo transcurrido.
5. Repetir dos veces más para tener un total de tres mediciones de flujo.

#### 5. Análisis de muestras por refractometría

1. Encender el refractómetro.
2. Tomar un tubo Eppendorf con muestra.
3. Con una pipeta Pasteur añadir unas gotas de la solución sobre el vidrio del refractómetro.
4. Retirar con papel el líquido excedente de la pipeta pasteur y dejar secar al aire para la siguiente medición.
5. Presionar el botón **Start** del refractómetro.
6. Anotar el índice de refracción de la muestra.
7. Con una jeringa aspirar el líquido del refractómetro y verterlo en un beaker aparte.
8. Con un *Kimwipe* secar el líquido excedente.
9. Tomar otro tubo Eppendorf con otra muestra.
10. Con la pipeta Pasteur ya seca añadir unas gotas de líquido nuevamente en el vidrio del refractómetro y volver a obtener el índice de refracción.
11. Repetir el procedimiento con cada una de las muestras realizadas.

## B. Materiales, cristalería, equipo y reactivos

### 1. Materiales

Los materiales utilizados en cada destilación realizada fueron los siguientes:

- 2 cubetas de 40L
- 1 cubeta de 20L
- 1 manguera de aprox. 2m
- 40 tubos Eppendorf de plástico de 1.5mL
- 1 par de guantes de cuero
- 1 paleta grande
- 1 llave inglesa grande

Los materiales utilizados para el análisis de muestras mediante refractometría fueron los siguientes:

- 1 bulbo pequeño
- 1 jeringa
- Kimwipes

### 2. Cristalería

Cuadro XV.1: Cristalería volumétrica

Nombre	Marca	Capacidad	Incertidumbre
Beaker	ValueWare	50 mL	$\pm 10$ mL
Beaker	ValueWare	100 mL	$\pm 20$ mL
Probeta	Vitlab	25 mL	$\pm 0.5$ mL
Pipeta pasteur	n/a	n/a	n/a

### 3. Equipo

Los siguientes fueron los equipos utilizados en la experimentación realizada, de estos la torre de destilación es el equipo principal. La caldera y la torre de enfriamiento se utilizaron para proveer el agua de enfriamiento al condensador y el vapor necesario para la destilación. El refractómetro se utilizó para el análisis de las muestras tomadas. En el Cuadro XV.2 se presenta la información completa de cada uno. En las Figuras XV.1-XV.4 se presentan fotografías de los mismos.

### 4. Reactivos

Se utilizaron dos reactivos: etanol y metanol. Se usaron en total 10L de cada alcohol, estos se añadían a la solución en la primera destilación y se reutilizaba la solución en la segunda destilación. En el Cuadro XV.3 que se muestra en la página 182 se presenta la información completa de los reactivos utilizados.

Cuadro XV.2: Equipo

Nombre	Marca	Modelo	Precisión	Rango
Refractrómetro	Atago	RX-5000	$\pm 0.00004$	1.32700-1.58000
Torre de destilación	Armfield Technical Education Co.	CEH-RG-3625	n/a	n/a
Torre de enfriamiento	Baltimore Aircole Company	FXT-15	n/a	n/a
Caldera	Cleaver-Brooks	M200X-30	n/a	n/a
Cronómetro	CASIO	HS-3	$\pm 1/100s$	9h 59min 59s 99ms

Figura XV.1: Fotografía de la columna de destilación de platos de burbujeo



Ubicación: Laboratorio de Operaciones Unitarias. Depto. IQ, UVG.

Figura XV.2: Fotografía de la caldera pirotubular



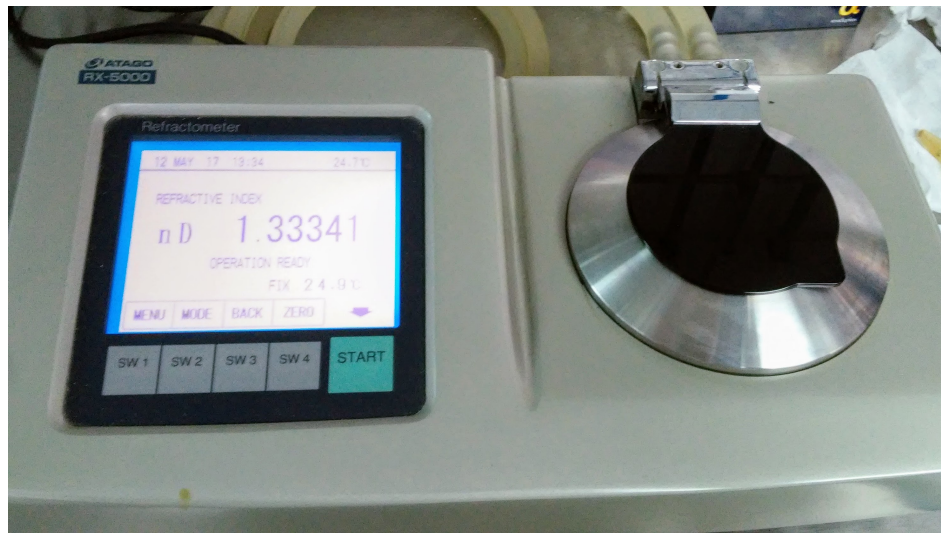
Ubicación: Laboratorio de Operaciones Unitarias. Depto. IQ, UVG.

Figura XV.3: Fotografía de la torre de enfriamiento





Ubicación: Laboratorio de Operaciones Unitarias. Depto. IQ, UVG.

Figura XV.4: Fotografía del refractómetro



Ubicación: Laboratorio de Operaciones Unitarias. Depto. IQ, UVG.

Cuadro XV.3: Información de los reactivos utilizados

Nombre	Proveedor	Pureza	Toxicidad	Medidas de seguridad	Forma de desecho	Rombo NFPA
Metanol	Distribuidora Mario Bathen S.A.	99 %	Ingestión: Disturbios visuales, vómito, inconciencia, ceguera convulsiones, acidosis metabólica, incluso muerte. Contacto: Se absorbe por la piel con efectos iguales a la inhalación. Inhalación: Irritación, asfixia, convulsiones.	Bata, monogafas, guantes de caucho o neopreno, usar mascarilla.	Desecho tóxico, enviar a incinerador.	
Etanol	Distribuidora Mario Bathen S.A.	95 %	Ingestión: Enervamiento alcohólico. Contacto: Irritación, resequedad Inhalación: Irritante y sofocante a altas concentraciones	Bata, Lentes	Enviar a incinerador Diluir y enviar al lavado	

## C. Datos originales

### 1. Destilaciones metanol-agua

En el Cuadro XV.4 se muestra los datos tomados sobre las condiciones de operación de la columna de destilación.

Cuadro XV.4: Condiciones de operación durante las destilaciones metanol-agua

	MetOH1	MetOH2		
	A	A	B	C
Instrumentación analógica de la columna de destilación				
Presión de vapor (kg/cm <sup>2</sup> )	0.75	-	0.45	0.40
Presión en el calderín (psi)	1.0	-	1.0	0.0
Temperatura en el calderín (°C)	83.5	-	82.0	81.0
Instrumentación del laboratorio de operaciones unitarias				
Pesión ambiente (mbar)	991.0	-	991.0	991.0
T amb (°C), Termómetro analógico	26.1	-	28.5	27.0
T amb (°C), Termómetro digital	26.7	-	29.3	27.5
Humedad	57 %	-	44 %	48 %
Temperaturas: pantalla de control de la columna de destilación				
T Plato 1	**	63.0	62.4	61.9
T Plato 2	**	62.8	62.2	61.7
T Plato 3	**	62.8	62.5	62.1
T Plato 4	**	63.3	63.0	62.6
T Plato 5	**	*	*	*
T Plato 6	**	64.0	63.9	63.5
T Plato 7	**	58.5	64.0	63.6
T Plato 8	**	68.4	66.1	65.8
T Plato 9	**	*	*	*
T Plato 10	**	91.6	93.3	93.5
Otros datos: pantalla de control de la columna de destilación				
Presión de vapor	**	2.4	2.6	3.3
T agua Salida	**	27.8	25.9	25.5
T agua Entrada	**	23.8	23.2	22.8

- Datos no tomados durante la experimentación.

\* Valores faltantes por estar desconectadas las termocuplas.

\*\* Durante la primera destilación con metanol el sistema electrónico de control de la torre no funcionó correctamente.

Se tomaron también, en cada destilación el índice de refracción de muestras de líquido en cada etapa, siendo 0 una muestra pequeña de destilado<sup>12</sup>, 1 el plato superior de la columna, así sucesivamente hasta 10 y por la muestra 11 es una muestra del líquido en el calderín.

Al inicio antes de iniciar la destilación se tomaron también tres muestras del calderín para obtener la concentración de la solución alimentada. Finalmente se tomaron, para cada destilación, mediciones de tiempo y de volumen para determinar el flujo de condensados.

Cuadro XV.5: Índice de refracción del líquido en los platos - MetOH 1

Muestra	A	B	C
0	1.33346	1.33295	1.33247
1	1.34646*	1.34167	1.33411
2	1.35313*	1.33290	1.33277
3	1.34331*	1.33448	1.33297
4	1.34760*	1.33850	1.33333
5	1.35270*	1.33667	1.33349
6	1.34156	1.33575	1.33429
7	1.34277	1.33773	1.33462
8	1.34107	1.33469	1.33341
9	1.33822	1.33644	1.33595
10	1.34119	1.34076	1.34061
11	1.33662	1.33632	1.33566

\* nD por fuera del rango correspondiente a una solución metanol-agua.

Cuadro XV.6: Índice de refracción de la alimentación - MetOH 1

Muestra	nD
1	1.33779
2	1.33767
3	1.33777

Cuadro XV.7: Medición de condensados - MetOH 1

Muestra	Volumen (mL)	Tiempo (seg)
1	23.5	6.41
2	17.5	5.32
3	23.0	6.71

<sup>12</sup>Técnicamente no se saca destilado ya que estamos trabajando a reflujo total, pero se extrajo una muestra pequeña (aprox 2mL) para saber la concentración del flujo  $L_0$  que es la misma que la del flujo  $D$ .

Cuadro XV.8: Índice de refracción del líquido en los platos - MetOH 2

Muestra	A	B	C
0	1.33719	1.33509	1.33752
1	1.33714	1.33577	1.33339
2	1.33854	1.33487	1.33313
3	1.33932	1.33483	1.33333
4	1.33522	1.33383	1.33341
5	1.33869	1.33417	1.33291
6	1.34013	1.33632	1.33518
7	1.34484*	1.34039	1.33819
8	1.34494*	1.34114	1.34149
9	1.34512*	1.34411*	1.34413*
10	1.34474*	1.34523*	1.34576*
11	1.33618	1.33646	1.33644

\* nD por fuera del rango correspondiente a una solución metanol-agua.

Cuadro XV.9: Índice de refracción de la alimentación - MetOH 2

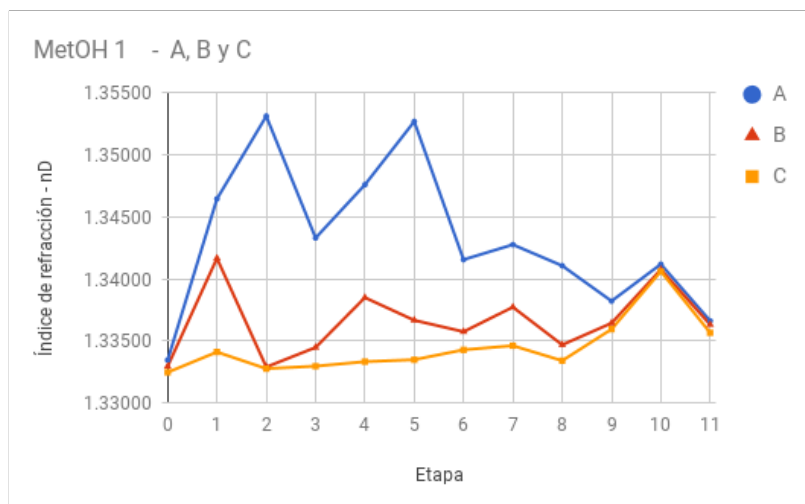
Muestra	nD
1	1.33768
2	1.33820
3	1.33784

Cuadro XV.10: Medición de condensados - MetOH 2

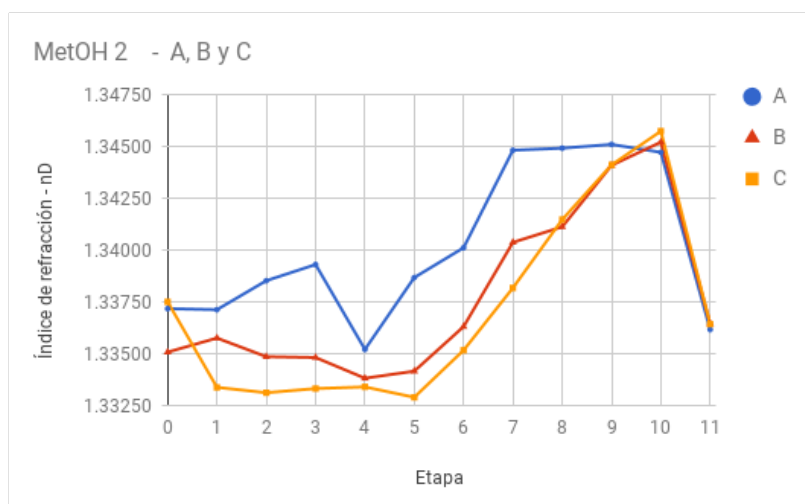
Muestra	Volumen (mL)	Tiempo (seg)
1	11.0	3.80
2	35.5	9.14
3	11.0	10.27

Figura XV.5: Índices de refracción (nD) en las destilaciones metanol-agua

(a) MetOH 1



(b) MetOH 2



## 2. Destilaciones etanol-agua

A continuación se muestran los cuadros con los datos obtenidos durante las tres corridas etanol-agua. En el Cuadro XV.23 se muestran la información de las condiciones de operación durante las tres destilaciones etanol-agua realizadas. En la Figura XV.6 se muestran las gráficas de los índices de refracción obtenidos.

Cuadro XV.11: Índice de refracción del líquido en los platos - EtOH 1

Muestra	A	B	C
0	1.34897	1.35481	1.35706
1	1.36050	1.36142	1.36175
2	1.35949	1.36172	1.36201
3	1.35622	1.36201	1.36199
4	1.35956	1.36170	1.36193
5	1.35818	1.36198	1.36208
6	1.36064	1.36160	1.36164
7	1.35457	1.36158	1.36165
8	1.35996	1.36161	1.36151
9	1.36045	1.36131	1.36147
10	1.35937	1.36037	1.36113
11	1.34300	1.34149	1.33693

Cuadro XV.12: Índice de refracción de la alimentación - EtOH 1

Muestra	nD
1	1.33960
2	1.33944
3	1.33958

Cuadro XV.13: Medición de condensados - EtOH 1

Muestra	Volumen (mL)	Tiempo (seg)
1	49.0	9.32
2	34.0	10.01
3	40.0	12.06

Cuadro XV.14: Índice de refracción del líquido en los platos - EtOH 2

Muestra	A	B	C
0	1.36175	1.36172	1.36168
1	1.36226	1.36245	1.36238
2	1.36236	1.36252	1.36252
3	1.36258	1.36229	1.36262
4	1.36242	1.36262	1.36262
5	1.36257	1.36245	1.36217
6	1.36132	1.36041	1.35530
7	1.36045	1.35900	1.35577
8	1.35761	1.34957	1.34621
9	1.34802	1.34667	1.34471
10	1.35501	1.35187	1.34646
11	1.33546	1.33482	1.33408

Cuadro XV.15: Índice de refracción de la alimentación - EtOH 2

Muestra	nD
1	1.33637
2	1.33652
3	1.33641

Cuadro XV.16: Medición de condensados - EtOH 2

Muestra	Volumen (mL)	Tiempo (seg)
1	22.7	12.96
2	22.5	12.61
3	18.5	10.06

Cuadro XV.17: Índice de refracción del líquido en los platos - EtOH 3

Muestra	A	B	C
0	1.36453	1.36450	1.36448
1	1.36355	1.36379	1.36364
2	1.35879	1.36022	1.36065
3	1.33936	1.34150	1.34822
4	1.34039	1.33630	1.33676
5	1.33662	1.33644	1.33595
6	1.33549	1.33565	1.33506
7	1.33746	1.33540	1.33561
8	1.33675	1.33763	1.33595
9	1.33515	1.33418	1.33438
10	1.33815	1.33485	1.33588
11	1.33473	1.33308	1.33350

Cuadro XV.18: Índice de refracción de la alimentación - EtOH 3

Muestra	nD
1	1.33634
2	1.33629
3	1.33630

Cuadro XV.19: Medición de condensados - EtOH 3

Muestra	Volumen (mL)	Tiempo (seg)
1	20.5	5.30
2	21.2	7.62
3	15.5	5.57

Cuadro XV.20: Duración de las corridas después de estabilizar la columna de destilación

	MetOH 1	MetOH 2	EtOH 1	EtOH 2	EtOH 3
Duración h:min	1:45	1:39	1:18	1:18	0:47

Cuadro XV.21: Volumen de solución utilizado durante cada corrida

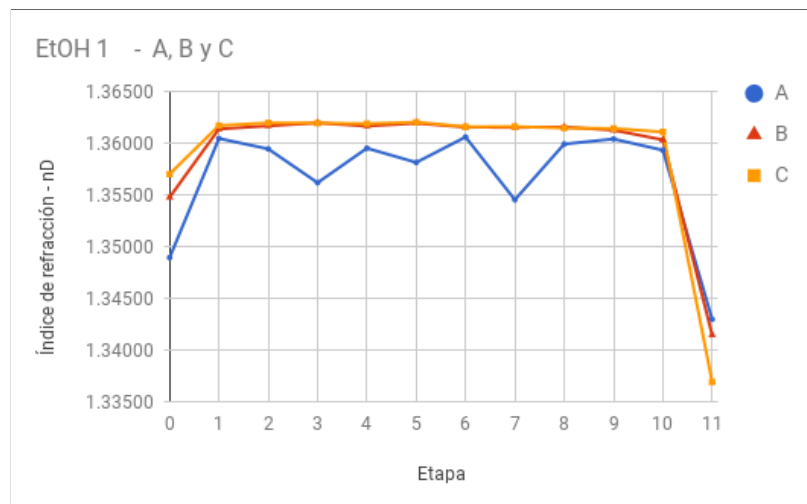
	MetOH 1	MetOH 2	EtOH 1	EtOH 2	EtOH 3
Volumen (L)	60.0	47.4	60.0	52.1	45.5

Cuadro XV.22: Flujo de agua proveniente de la torre de enfriamiento

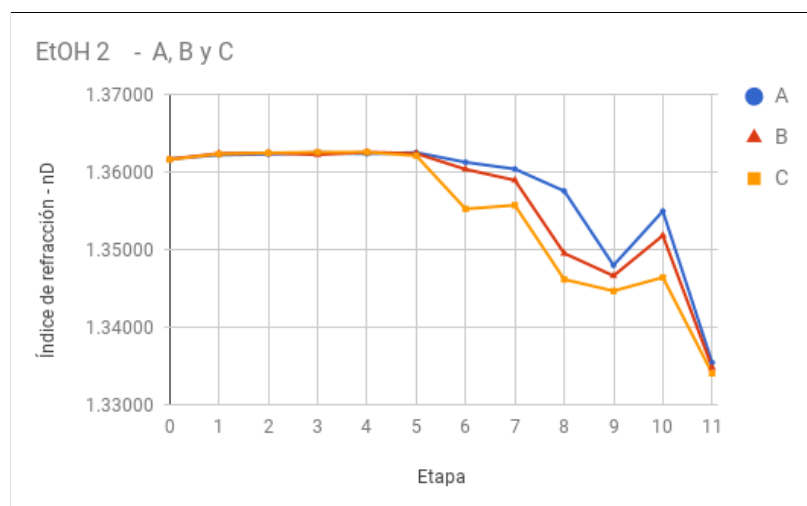
Muestra	Volumen (mL)	Tiempo	No. de Agujeros
1	9.6	1.78	48
2	10.0	2.30	48
3	10.0	2.00	48

Figura XV.6: Índices de refracción (nD) en las destilaciones etanol-agua

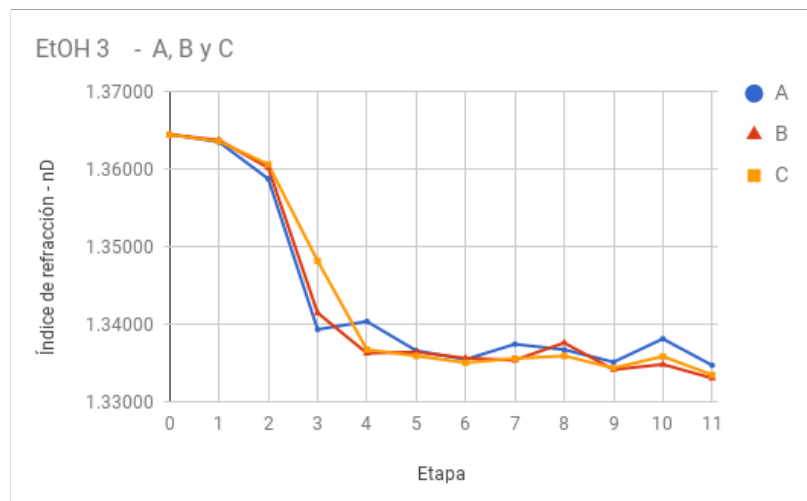
(a) EtOH 1



(b) EtOH 2



(c) EtOH 3



Cuadro XV.23: Condiciones de operación durante las destilaciones etanol-agua

	EtOH 1			EtOH 2			EtOH 3		
	A	B	C	A	B	C	A	B	C
Instrumentación analógica de la columna de destilación									
Presión de vapor (kg/cm <sup>2</sup> )	0.70	0.75	0.80	0.90	0.95	0.95	0.85	0.90	0.80
Presión en el calderín (psi)	-	-	-	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
Temperatura en el calderín (°C)	-	-	-	88.0	88.0	89.0	91.0	91.0	90.0
Instrumentación del laboratorio de operaciones unitarias									
Pesión ambiente (mbar)	991.0	991.0	991.0	991.0	991.0	991.0	991.0	991.0	991.0
T amb (°C), Termómetro analógico	26.0	26.4	26.8	25.7	25.2	24.5	26.4	26.2	26.0
T amb (°C), Termómetro digital	26.7	26.9	27.0	26.7	26.2	25.5	27.5	27.5	27.2
Humedad	46 %	44 %	50 %	51 %	52 %	56 %	46 %	46 %	49 %
Temperaturas (°C): pantalla de control de la columna de destilación									
T Plato 1	-	74.3	74.1	74.5	73.8	73.8	76.3	76.0	75.9
T Plato 2	-	74.2	74.3	74.5	74.0	74.0	77.6	76.8	77.3
T Plato 3	-	74.7	74.9	73.9	73.6	73.4	83.5	81.6	88.0
T Plato 4	-	75.2	75.5	75.7	75.7	76.1	91.1	90.7	90.0
T Plato 5	-	75.4	75.8	76.5	77.6	77.6	92.3	92.7	90.2
T Plato 6	-	76.1	76.4	77.2	79.5	81.6	92.3	93.7	90.9
T Plato 7	-	75.1	75.1	77.5	80.6	82.3	91.3	92.7	90.0
T Plato 8	-	75.8	76.2	82.3	82.7	83.8	92.0	93.5	89.4
T Plato 9	-	97.0	98.2	108.0	107.0	107.0	108.0	109.0	110.0
T Plato 10	-	93.1	93.5	104.0	105.0	108.0	102.0	104.0	106.0
Otros datos: pantalla de control de la columna de destilación									
Presión de vapor	-	10.0	5.7	13.8	13.9	15.1	13.8	13.1	12.1
T agua Salida	-	27.0	26.0	23.4	23.0	23.1	22.6	29.5	30.0
T agua Entrada	-	22.2	23.3	22.1	21.6	21.3	29.3	22.6	22.5

- Datos no tomados durante la experimentación.



### 3. Cuadros de los índices de refracción de soluciones alcohol-agua

Para obtener la concentración de las soluciones a partir de los índices de refracción (nD) se utilizaron datos obtenidos de la página de ©Mettler-Toledo International Inc. en porcentaje peso<sup>13</sup>.

Cuadro XV.24: Índice de refracción a varias concentraciones de una solución metanol-agua (+20 °C)

$X$ (frac.peso)	$x$ (frac.mol) <sup>a</sup>	nD MetOH	$X$ (frac.peso)	$x$ (frac.mol)	nD MetOH
0.005	0.002	1.3331	0.320	0.124	1.3411
0.010	0.003	1.3332	0.340	0.134	1.3415
0.015	0.005	1.3333	0.360	0.144	1.3419
0.020	0.006	1.3334	0.380	0.155	1.3422
0.025	0.008	1.3335	0.400	0.167	1.3425
0.030	0.009	1.3336	0.420	0.178	1.3427
0.035	0.011	1.3337	0.440	0.191	1.3429
0.040	0.012	1.3338	0.460	0.203	1.3430
0.045	0.014	1.3340	0.480	0.217	1.3431
0.050	0.016	1.3341	<b>0.500</b>	<b>0.231</b>	<b>1.3431*</b>
0.055	0.017	1.3342	0.520	0.245	1.3431
0.060	0.019	1.3343	0.540	0.260	1.3430
0.065	0.020	1.3345	0.560	0.276	1.3429
0.070	0.022	1.3346	0.580	0.293	1.3428
0.075	0.024	1.3347	0.600	0.310	1.3426
0.080	0.025	1.3348	0.620	0.328	1.3425
0.085	0.027	1.3350	0.640	0.348	1.3422
0.090	0.029	1.3351	0.660	0.368	1.3419
0.095	0.031	1.3352	0.680	0.389	1.3415
0.100	0.032	1.3354	0.700	0.412	1.3411
0.110	0.036	1.3356	0.720	0.435	1.3407
0.120	0.039	1.3359	0.740	0.460	1.3402
0.130	0.043	1.3362	0.760	0.487	1.3397
0.140	0.047	1.3365	0.780	0.515	1.3391
0.150	0.050	1.3367	0.800	0.545	1.3385
0.160	0.054	1.3370	0.820	0.577	1.3379
0.170	0.058	1.3373	0.840	0.611	1.3372
0.180	0.062	1.3376	0.860	0.648	1.3365
0.190	0.066	1.3379	0.880	0.687	1.3357
0.200	0.070	1.3381	0.900	0.730	1.3348
0.220	0.078	1.3387	0.920	0.775	1.3339
0.240	0.086	1.3392	0.940	0.824	1.3328
0.260	0.095	1.3397	0.960	0.878	1.3316
0.280	0.104	1.3402	0.980	0.936	1.3304
0.300	0.114	1.3407	1.000	1.000	1.3290

\* Valor de nD máximo. A partir de aquí los valores descienden con la concentración.

<sup>a</sup> Se realiza la conversión de fracción peso ( $X$ ) a fracción mol ( $x$ ) mediante  $x = \frac{X/M_{\text{EtOH}}}{X/M_{\text{EtOH}} + (1-X)/M_{\text{H}_2\text{O}}}$ .

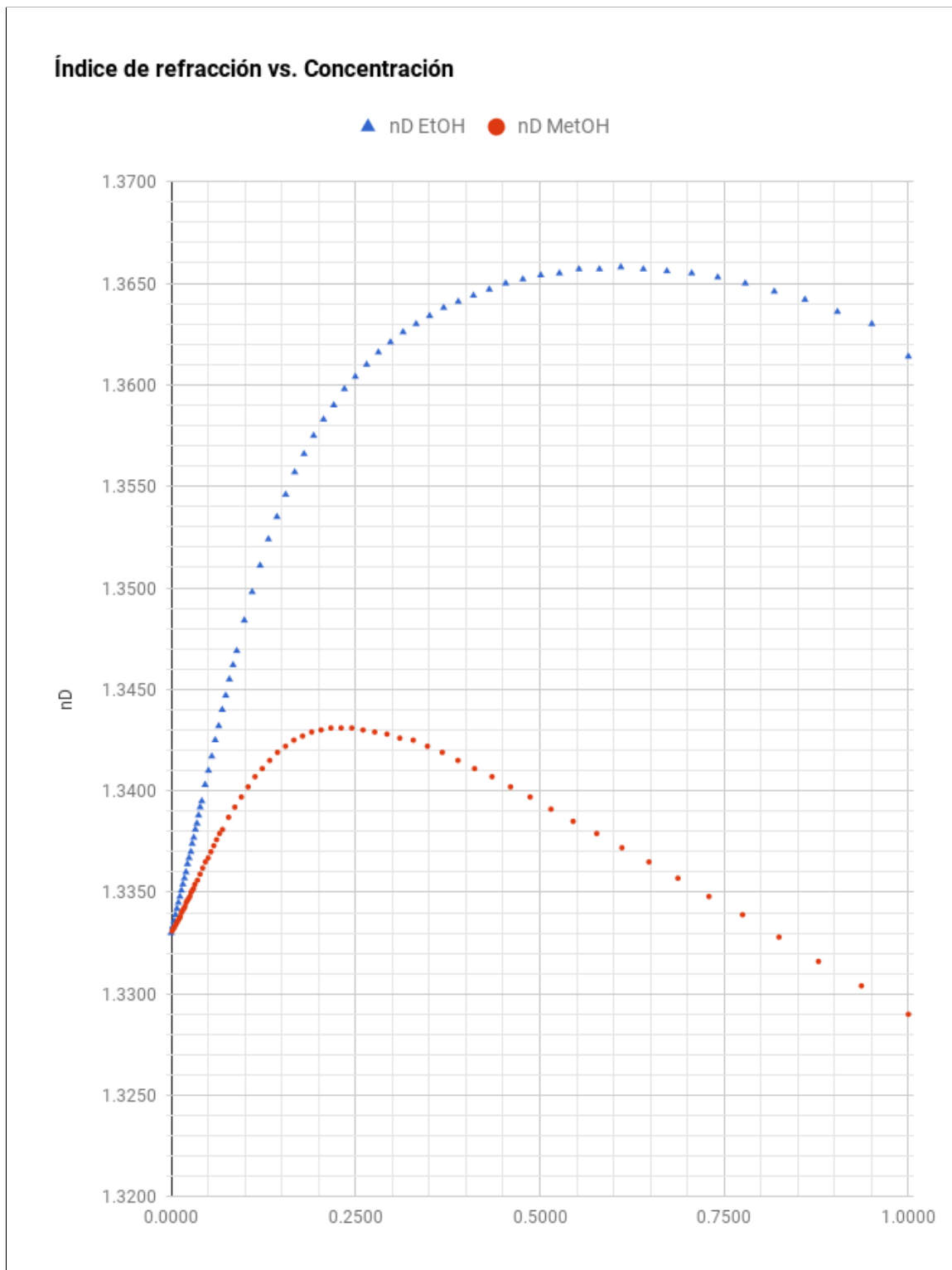
<sup>13</sup>Pueden obtenerse de los siguientes enlaces: Etanol [http://bit.ly/MT\\_Etanol](http://bit.ly/MT_Etanol) y Metanol [http://bit.ly/MT\\_Metanol](http://bit.ly/MT_Metanol)

Cuadro XV.25: Índice de refracción a varias concentraciones de una solución etanol-agua (+20 °C)

$X$ (frac.peso)	$x$ (frac.mol)	nD EtOH	$X$ (frac.peso)	$x$ (frac.mol)	nD EtOH
0.000	0.000	1.3330	0.320	0.155	1.3546
0.005	0.002	1.3333	0.340	0.168	1.3557
0.010	0.004	1.3336	0.360	0.180	1.3566
0.015	0.006	1.3339	0.380	0.193	1.3575
0.020	0.008	1.3342	0.400	0.207	1.3583
0.025	0.010	1.3345	0.420	0.221	1.3590
0.030	0.012	1.3348	0.440	0.235	1.3598
0.035	0.014	1.3351	0.460	0.250	1.3604
0.040	0.016	1.3354	0.480	0.265	1.3610
0.045	0.018	1.3357	0.500	0.281	1.3616
0.050	0.020	1.3360	0.520	0.298	1.3621
0.055	0.022	1.3364	0.540	0.315	1.3626
0.060	0.024	1.3367	0.560	0.332	1.3630
0.066	0.027	1.3370	0.580	0.351	1.3634
0.070	0.029	1.3374	0.600	0.370	1.3638
0.075	0.031	1.3377	0.620	0.390	1.3641
0.080	0.033	1.3381	0.640	0.410	1.3644
0.085	0.035	1.3384	0.660	0.432	1.3647
0.090	0.037	1.3388	0.680	0.454	1.3650
0.095	0.039	1.3392	0.700	0.477	1.3652
0.100	0.042	1.3395	0.720	0.501	1.3654
0.110	0.046	1.3403	0.740	0.527	1.3655
0.120	0.051	1.3410	0.760	0.553	1.3657
0.130	0.055	1.3417	0.780	0.581	1.3657
0.140	0.060	1.3425	<b>0.800</b>	<b>0.610</b>	<b>1.3658*</b>
0.150	0.065	1.3432	0.820	0.640	1.3657
0.160	0.069	1.3440	0.840	0.672	1.3656
0.170	0.074	1.3447	0.860	0.706	1.3655
0.180	0.079	1.3455	0.880	0.741	1.3653
0.190	0.084	1.3462	0.900	0.779	1.3650
0.200	0.089	1.3469	0.920	0.818	1.3646
0.220	0.099	1.3484	0.940	0.860	1.3642
0.240	0.110	1.3498	0.960	0.904	1.3636
0.260	0.121	1.3511	0.980	0.950	1.3630
0.280	0.132	1.3524	1.000	1.000	1.3614
0.300	0.144	1.3535			

\* Valor de nD máximo. A partir de aquí los valores descienden con la concentración.

Figura XV.8: Índice de refracción a distintas soluciones para los compuestos utilizados



## D. Cálculos de muestra

A continuación se detallará el tratamiento que se le dio a los datos obtenidos durante la experimentación. Se ejemplificará únicamente para la tercera destilación con etanol (EtOH 3) sin embargo el procedimiento realizado fue exactamente el mismo para todas las destilaciones.

### 1. Cálculo de concentraciones

En el Cuadro XV.18 se muestran los índices de refracción de la alimentación. Estos índices de refracción deben de compararse con los datos que se muestran en el Cuadro XV.25 para determinar la concentración a la que corresponden. Para la primera muestra de la solución de alimentación se obtuvo  $nD=1.33624$  y se encontró que se encuentra entre los siguientes datos:

	$x$	nD
a	0.02016	1.3360
b	0.02225	1.3364

Utilizamos con ellos la ecuación de interpolación lineal<sup>14</sup>:

$$x = x_a + (nD - nD_a) * \frac{x_b - x_a}{nD_b - nD_a}$$

$$x = 0.02016 + (1.33634 - 1.3360) * \frac{0.02225 - 0.02016}{1.3364 - 1.3360} = 0.0219 = 2.19 \% \text{ mol}$$

Realizando el mismo procedimiento se obtuvo cada concentración de la alimentación:

Cuadro XV.26: Concentración de la solución alimentada EtOH 3

Muestra	nD	$x$
1	1.33634	2.19 %
2	1.33629	2.17 %
3	1.33630	2.17 %

Luego seguimos con las muestras líquidas de cada plato en cada Toma (A, B y C). Durante la experimentación, cada toma se realizó de forma rápida de manera que las concentraciones obtenidas nos indicaran el pseudoequilibrio logrado en la columna. Para la Toma A y las otras dos tomas el índice de refracción obtenido se encuentra en el Cuadro XV.17. Con estos valores se realiza nuevamente interpolación lineal, al igual que en la alimentación. Sin embargo, debe tomarse en cuenta lo siguiente:

- Los valores de nD aumentan con  $x$  al inicio pero después disminuyen. Debe de verificarse bien si hay dos concentraciones posibles<sup>15</sup> (una de alta concentración y una de baja) en cuyo caso debe elegirse la más adecuada de acuerdo a la etapa y a las otras concentraciones obtenidas.
- Idealmente las etapas más altas en la columna (Etapa 0=Destilado, 1, 2, etc.) debieran tener las concentraciones más altas.
- Las etapas más bajas en la columna (11, 10, 9, etc.) debieran tener las  $x$  más bajas.
- Si no se cumple con este orden es indicio de que los flujos de vapor y del líquido no fueron constantes a lo largo de la columna.

De esta forma, mediante interpolación lineal utilizando los datos de los Cuadros XV.24 y XV.25 se obtienen las concentraciones para cada destilación. En este caso para la Toma A se obtuvieron las siguientes concentraciones:

<sup>14</sup>Puede utilizarse manualmente o realizarse utilizando la función =PRONOSTICO en una hoja de cálculo.

<sup>15</sup>En el caso de las soluciones metanol-agua es casi seguro debido al comportamiento del índice de refracción, ver Figura XV.8.

Cuadro XV.27: Porcentaje de etanol en cada plato - EtOH 3

Toma A	nD	$x$
0	1.36453	41.94 %
1	1.36355	35.78 %
2	1.35879	21.65 %
3	1.33936	4.06 %
4	1.34039	4.67 %
5	1.33662	2.38 %
6	1.33549	1.67 %
7	1.33746	2.90 %
8	1.33675	2.48 %
9	1.33515	1.43 %
10	1.33815	3.32 %
11	1.33473	1.15 %

## 2. Cálculo de la eficiencia de los platos

Teniendo ya las concentraciones obtendremos la eficiencia de los platos utilizando la definición de la *Eficiencia de Murphree*:

$$E_{ML} = \frac{x_j - x_{j-1}}{x_j^* - x_{j-1}} = \frac{x_{\text{real}} - x_{\text{anterior}}}{x_{\text{equilibrio}} - x_{\text{anterior}}}$$

Para la Etapa 1 de la toma A se obtiene la siguiente eficiencia:

$$E_{ML} = \frac{0.3578 - 0.4194}{0.097 - 0.4194} = 0.191$$

$$E_{ML} = 19.1 \%$$

Para las etapas de la 2 a la 11 se obtiene la eficiencia del líquido de la misma manera. En el Cuadro XV.28 se muestran las eficiencias para todas las etapas de la Toma A, y en el Cuadro XV.42 se presentan las eficiencias de las otras tomas de esta destilación.

Cuadro XV.28: Eficiencia de los platos - EtOH 3, Toma A

Etapa	Anterior $x_{j-1}$	Real $x_j$	Equilibrio $x_j^*$	$E_{ML}$
1	0.419	0.358	0.097	<b>19.1 %</b>
2	0.358	0.217	0.074	<b>49.7 %</b>
3	0.217	0.041	0.037	<b>98.0 %</b>
4	0.041	0.047	0.006	<b>-17.7 %</b>
5	0.047	0.024	0.007	<b>58.0 %</b>
6	0.024	0.017	0.004	<b>35.5 %</b>
7	0.017	0.029	0.003	<b>-87.9 %</b>
8	0.029	0.025	0.005	<b>17.3 %</b>
9	0.025	0.014	0.004	<b>49.9 %</b>
10	0.014	0.033	0.002	<b>-156.4 %</b>
11	0.033	0.011	0.005	<b>77.5 %</b>

### 3. Diagramas de McCabe-Thiele a partir de los valores obtenidos

Graficamos luego las concentraciones obtenidas en un diagrama  $x-y$  graficando también la curva de equilibrio (Cuadro XV.29). Tenemos los valores de  $x$  para cada etapa y debemos unir dichos valores de manera escalonada para formar las etapas. En la experimentación los valores  $x$  no descendieron de forma estable y por ello aquellos valores que indicaban un aumento en la concentración no se tomaron en cuenta para graficar. En vez de estos valores se tomó siempre el valor  $x$  anterior y se mantuvo este valor en las etapas siguientes que tenían valores  $x$  mayores. Se realizó de esta manera que de no hacerlo así las etapas regresan” lo cual genera confusión en el gráfico.

Si iniciamos en  $(x_D, x_D)$ , sobre la línea de  $45^\circ$  nuestro siguiente punto para formar la escalera es a la misma altura  $y = x_D$  pero en el nuevo valor de  $x$  ( $x = x_1$ ) es decir en el punto  $(x_1, x_D)$ . Nuestro siguiente punto tiene que ser a la misma concentración del líquido pero sobre la línea de  $45^\circ$ , ya que estamos trabajando con reflujo total, es decir  $(x_1, x_1)$ . El siguiente punto sería  $(x_2, x_1)$ , luego  $(x_2, x_2)$  y así sucesivamente hasta completar la escalera.

Los valores utilizados para la tercera destilación etanol-agua, Toma A se muestran en el Cuadro XV.30. Para graficar el pseudoequilibrio se unen únicamente los puntos de las esquinas del escalonado, es decir:  $(x_1, x_D)$ ,  $(x_2, x_1)$ , etc. Los valores utilizados se muestran en el Cuadro XV.31.

Cuadro XV.29: Curva de equilibrio etanol-agua y diagonal de  $45^\circ$

x1	y1	$45^\circ$
0.00	0.0000	0.00
0.05	0.3213	0.05
0.10	0.4376	0.10
0.15	0.4966	0.15
0.20	0.5329	0.20
0.25	0.5588	0.25
0.30	0.5799	0.30
0.35	0.5989	0.35
0.40	0.6173	0.40
0.45	0.6361	0.45
0.50	0.6561	0.50
0.55	0.6775	0.55
0.60	0.7009	0.60
0.65	0.7265	0.65
0.70	0.7548	0.70
0.75	0.7859	0.75
0.80	0.8203	0.80
0.85	0.8584	0.85
0.90	0.9006	0.90
0.95	0.9476	0.95
1.00	1.0000	1.00

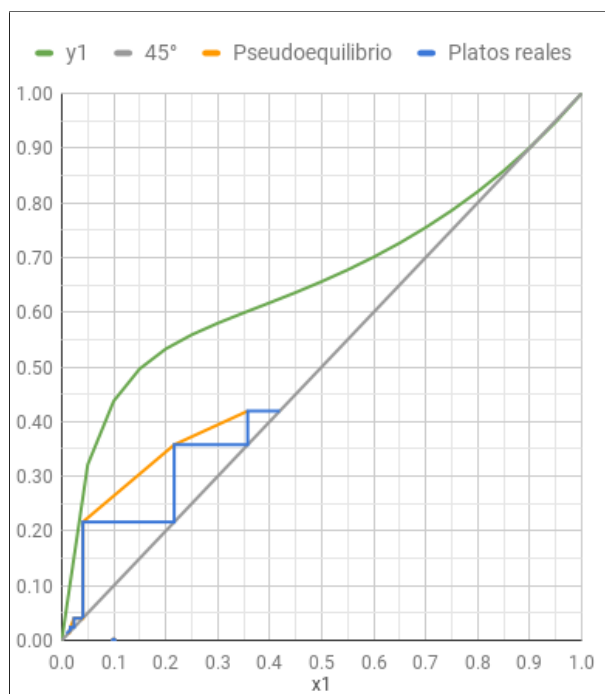
Cuadro XV.30: Valores para graficar la escalera de la operación realizada

Etapa	$x$	$y$
0= $L_0$	0.419	0.419
1	0.358	0.419
1	0.358	0.358
2	0.217	0.358
2	0.217	0.217
3	0.041	0.217
3	0.041	0.041
4	0.041	0.041
4	0.041	0.041
5	0.024	0.041
5	0.024	0.024
6	0.017	0.024
6	0.017	0.017
7	0.017	0.017
7	0.017	0.017
8	0.017	0.017
8	0.017	0.017
9	0.014	0.017
9	0.014	0.014
10	0.014	0.014
10	0.014	0.014
11= $R$	0.011	0.014
11= $R$	0.011	0.011

Cuadro XV.31: Valores para graficar el pseudoequilibrio

Etapa	$x$	$y$
0= $L_0$	0.419	
1	0.358	0.419
2	0.217	0.358
3	0.041	0.217
4	0.041	0.041
5	0.024	0.041
6	0.017	0.024
7	0.017	0.017
8	0.017	0.017
9	0.014	0.017
10	0.014	0.014
11= $R$	0.011	0.014

Figura XV.9: Diagrama realizado para la destilación EtOH 3, Toma A



#### 4. Eficiencia del líquido según el simulador

Ahora ingresaremos los datos obtenidos durante la destilación en el simulador de la hoja de cálculo realizada. Obtenemos primero el promedio de las composiciones  $x_D$ ,  $x_F$  y  $x_W$ , por ejemplo para  $x_f$  se presentan en el Cuadro XV.45 los valores promedio obtenidos. Estos se obtuvieron utilizando la función `=PROMEDIO` en una hoja de cálculo de Google. También se obtuvo la desviación estándar utilizando la función `=DESVEST`. Estos valores promedio obtenidos se ingresan en el simulador de la siguiente forma:

$x_d$	41.75	% mol
$x_f$	2.18	% mol
$x_w$	0.51	% mol

También se seleccionan las siguientes configuraciones en el simulador:

Tipo de destilación:	Rehervidor
Tipo de alimentación:	Líqu. subenfriado T.entrada
Temperatura de referencia:	Personalizado

Utilizamos como temperatura de referencia y temperatura de entrada 25°C pero en Kelvin, es decir 298.15 K. Luego bajamos en la hoja de cálculo, ya aparece la curva  $q$ , en este caso no hay tangencia en el enriquecimiento por lo que seleccionamos dicha opción, ingresamos el valor de  $x$  en el cual la curva  $q$  cruza el equilibrio tal y como se muestra a continuación:

Sin Tangencia	
$x$	0.059

Deseamos ver el número de platos ideales requeridos a reflujo total por lo que seleccionamos la opción `Mostrar` y obtenemos lo siguiente:

Mostrar Nm 3.00

Con este valor del número ideal de platos requeridos para la destilación a reflujo total podemos obtener la eficiencia global ( $E_o$ ) de la operación. Esto lo obtenemos mediante:

$$E_o = \frac{\text{Platos ideales}}{\text{Platos reales}} = \frac{3}{11} = 0.2727$$

$$E_o = 27.27\%$$

Ahora, como deseamos simular una operación a reflujo total ingresamos una relación de reflujo de 200 ya que con este valor las líneas de operación se acercan a la diagonal de manera que quedan por sobre ella.

Relación de reflujo específica

200 R

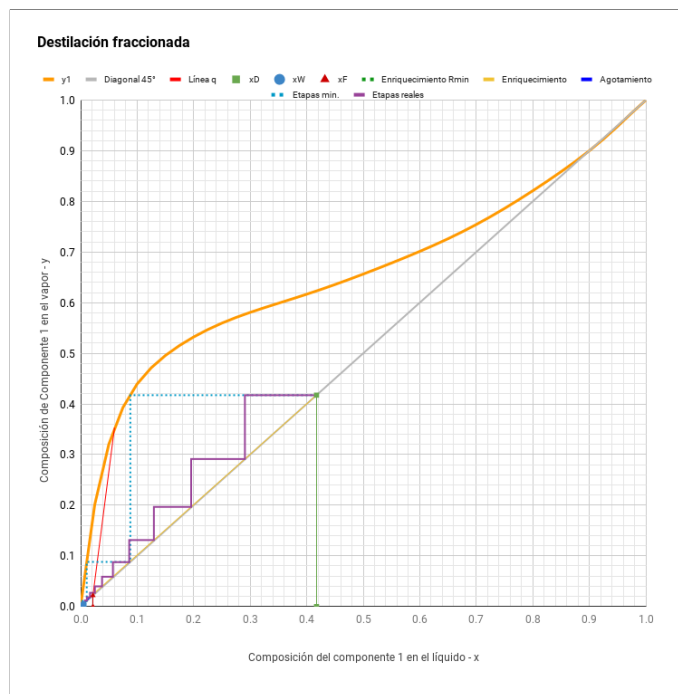
Obtenemos nuevamente 3 etapas mínimas. Sin embargo en nuestra experimentación contábamos con 11 etapas. Al realizar la operación a reflujo total la operación no fue completamente eficiente y es esta eficiencia la que queremos conocer. Por tanto en la opción de eficiencia seleccionaremos la eficiencia del líquido y modificaremos el valor de la eficiencia hasta obtener las 11 etapas con las cuales trabajamos:

Em del líquido

EmL 0.385

Np 11 platos

Figura XV.10: Simulación de la destilación EtOH 3 a reflujo total



De esta manera se obtuvo que de acuerdo al simulador se operó con una eficiencia<sup>16</sup> ( $E_{mL}$ ) del 38.5%. El Cuadro XV.48 presenta todos los valores obtenidos para las destilaciones realizadas.

<sup>16</sup> Asumiendo que se tuvo la misma eficiencia para todas las etapas

## 5. Cargas térmicas en la columna

Calculamos ahora la carga térmica del condensador y del rehervidor. Para calcular la carga térmica del condensador tenemos los siguientes valores de temperatura que se encuentran en la sección *Datos Originales* en el Cuadro XV.23.

$$T_{\text{salida}} = 300.5 \text{ K}$$

$$T_{\text{salida}} = 298.0 \text{ K}$$

Calculamos la diferencia de temperatura del agua

$$\Delta T = 300.5 - 298.0 = 2.57 \text{ K}$$

El flujo de agua fría se obtiene de los datos del Cuadro XV.22. Se tomaron las mediciones de flujo en uno solo de los agujeros del distribuidor en la parte superior de la torre de enfriamiento. Si se asume que el flujo es el mismo para cada uno de los 48 agujeros entonces el flujo de agua está dado, para la muestra 1, por:

$$\dot{m} = \frac{V}{t} * 48 = \frac{9.6 \text{ mL}}{1.78 \text{ s}} * 48 = 258.88 \text{ mL/s}$$

Se obtienen para las muestras 2 y 3 el flujo de la misma forma y luego se obtuvo el promedio el cual se muestra en el Cuadro XV.51. Convertimos este flujo a mol/h utilizando la densidad y el peso molecular:

$$235.86 \text{ mL/s} * \frac{1 \text{ g}}{1 \text{ mL}} * \frac{3600 \text{ s}}{1 \text{ h}} * \frac{1 \text{ mol}}{18.015 \text{ g}} = 47132.19 \text{ mol/h}$$

La capacidad calorífica del agua se obtuvo del simulador a la temperatura de referencia (298.15 K):

$$C_{pL} = 75.384 \text{ J/mol K}$$

Por tanto la carga térmica, por hora, del condensador es de:

$$\dot{Q}_c = \dot{m} C_{pL} \Delta T$$

$$\dot{Q}_c = 47132.19 \text{ mol/h} * 75.384 \text{ J/mol} * 2.57 \text{ K}$$

$$\dot{Q}_c = 9119400.76 \text{ J/h}$$

Si tomamos en cuenta la duración de la corrida (Cuadro XV.20) que fue de 47 minutos podremos obtener el calor total retirado por el condensador. Primero convertimos de minutos a horas.

$$\theta = 47 \text{ min} * \frac{1 \text{ h}}{60 \text{ min}} = 0.78 \text{ h}$$

Por tanto la carga térmica del condensador fue de:

$$Q_c = \dot{Q}_c * \theta = 9119400.76 \text{ J/h} * 0.78 \text{ h}$$

$$Q_c = 7143530.60 \text{ J}$$

Ahora calcularemos la carga térmica del rehervidor o calderín. El flujo de condensados se obtiene de los datos de Cuadro XV.19. Para la muestra 1 el flujo de vapor condensado es:

$$\dot{m} = \frac{V}{t} = \frac{20.5 \text{ mL}}{5.30 \text{ s}} = 3.87 \text{ mL/s}$$

Se realiza la misma operación para las otras tres muestras, y se obtienen tres flujos de condensado tal y como se muestra en el Cuadro XV.50. Obtenemos un promedio de los tres flujos y luego los convertimos a mol/h:

$$3.14 \text{ mL/s} * \frac{1 \text{ g}}{1 \text{ mL}} * \frac{3600 \text{ s}}{1 \text{ h}} * \frac{1 \text{ mol}}{18.015 \text{ g}} = 628.33 \text{ mol/h}$$

Obtenemos luego el calor latente de vapor de agua a 0.978 atmósferas, temperatura de saturación de 372.53 K, obtenemos:

$$\lambda = 40827.43 \text{ J/mol}$$

Luego la carga térmica del rehervidor está dado por:

$$\dot{Q}_b = \dot{m} * \lambda$$

$$\dot{Q}_b = 25653200.93 \text{ J/h}$$

$$Q_b = \dot{Q}_b * \theta = 25653200.93 \text{ J/h} * 0.78 \text{ h}$$

$$Q_b = 20095007.29 \text{ J}$$

## 6. Balance de masa y energía

Durante la tercera destilación etanol-agua se tuvo un volumen inicial de 45.5 L. Convertimos este volumen a kilogramos utilizando la concentración ( $x_f$ ) y la densidad del etanol y del agua a temperatura ambiente:

$$x_f = 0.0218$$

$$\rho_{\text{agua}} = 1.000 \text{ g/mL}$$

$$\rho_{\text{etanol}} = 0.789 \text{ g/mL}$$

$$\rho_{\text{sol}} = x_f * \rho_{\text{etanol}} + (1 - x_f) * \rho_{\text{agua}} = 0.9954 \text{ g/mL}$$

$$m = V * \rho_{\text{sol}} = 45.5 \text{ V} * 0.9954 \text{ g/mL} = 45.29 \text{ kg}$$

El balance de masa para este caso, que se trabajó a reflujo total, está dado por:

$$\text{Entradas} - \text{Salidas} = \text{Masa acumulada}$$

$$F - D - W = \text{Masa Ac.}$$

$$F - 0 = F$$

$$45.29 \text{ kg} - 0 \text{ kg} = 45.29 \text{ kg}$$

Para el balance de energía tenemos que recordar que la temperatura de referencia utilizada fue la temperatura de alimentación<sup>17</sup> (278.15 K) por lo que el balance es:

$$FH_F + Q_b = DH_D + WH_W + Q_c + Q_T$$

$$0 + 20095007.29 \text{ J} = 0 + 0 + 7143530.60 \text{ J} + Q_T$$

$$Q_T = 20095007.29 \text{ J} - 7143530.60 \text{ J}$$

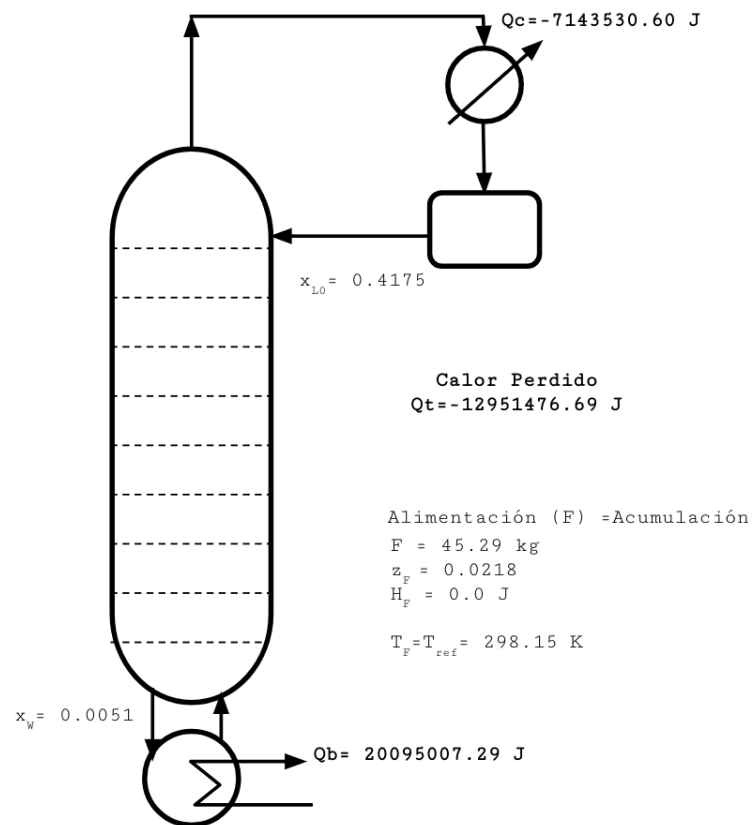
$$Q_T = 12951476.69 \text{ J}$$

<sup>17</sup> $FH_F = 0 \text{ J}$  porque la temperatura de referencia es la temperatura de alimentación.

## E. Diagrama de flujo

A continuación se presenta el diagrama de flujo para la tercera destilación etanol-agua (EtOH3). Los diagramas de flujo para las demás destilaciones tienen la misma forma solamente con los valores presentados en los cuadros de la sección *Datos calculados*.

Se muestra en este diagrama de flujo la operación realizada a reflujo total, por lo tanto no se tiene alimentación continua ni se extraen destilado o residuo. Toda la alimentación introducida constituye la acumulación en el interior de la columna. Las concentraciones se presentan en fracción mol.



## F. Datos calculados

### 1. Concentraciones de obtenidas durante las destilaciones

En función a los índices de refracción (nD) de las muestras de líquido tomadas en cada plato se obtuvieron las concentraciones correspondientes de acuerdo a lo indicado en la sección *Cálculos de muestra*. Las mismas concentraciones se grafican en la Figura XV.11 para las destilaciones metanol-agua y en la Figura XV.12 para las destilaciones etanol-agua.

Cuadro XV.32: Concentraciones ( $x$ ) de las tomas realizadas en la destilación MetOH 1

Muestra	A	B	C
0	79.49 %	81.77 %	83.92 %
1	*	38.01 %	76.45 %
2	*	82.00 %	82.58 %
3	*	74.58 %	81.68 %
4	*	54.52 %	80.07 %
5	*	63.92 %	79.35 %
6	38.59 %	68.49 %	75.54 %
7	29.54 %	58.56 %	73.87 %
8	41.34 %	73.52 %	79.71 %
9	56.02 %	65.10 %	67.51 %
10	40.65 %	43.17 %	43.98 %
11	4.88 %	4.43 %	3.64 %

\* Índice de refracción por fuera del rango correspondiente a una solución metanol-agua. Posible presencia de EtOH en la columna de destilación.

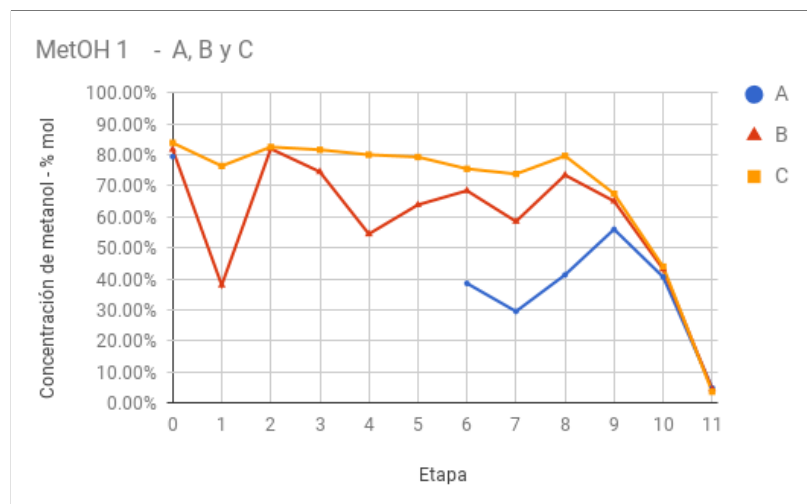
Cuadro XV.33: Concentraciones ( $x$ ) de las tomas realizadas en la destilación MetOH 2

Muestra	A	B	C
0	61.20 %	71.60 %	59.58 %
1	61.46 %	68.39 %	79.80 %
2	54.33 %	72.63 %	80.97 %
3	50.49 %	72.82 %	80.07 %
4	70.99 %	77.83 %	79.71 %
5	53.58 %	76.15 %	81.95 %
6	46.41 %	65.69 %	71.17 %
7	*	45.09 %	56.18 %
8	*	40.93 %	38.97 %
9	*	*	*
10	*	*	*
11	4.26 %	4.60 %	4.58 %

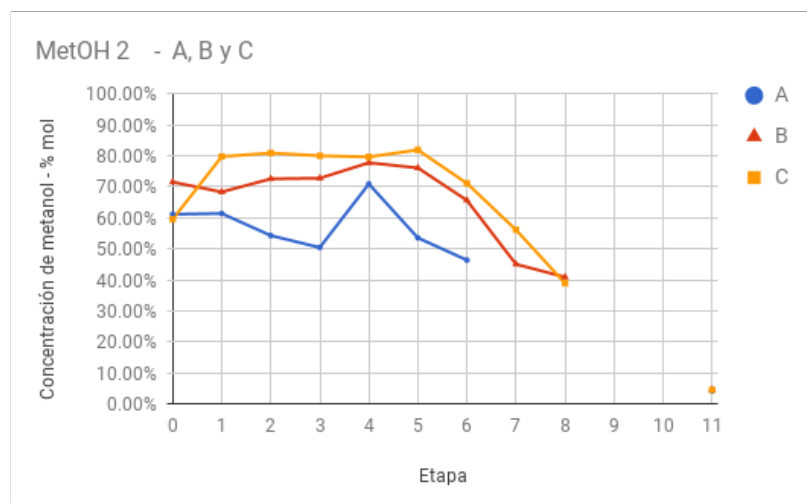
\* Índice de refracción por fuera del rango correspondiente a una solución metanol-agua. Posible presencia de EtOH en la columna de destilación.

Figura XV.11: Concentraciones ( $x$ ) en las destilaciones metanol-agua

(a) MetOH 1



(b) MetOH 2

Cuadro XV.34: Concentraciones ( $x$ ) de las tomas realizadas en la destilación EtOH 1

Muestra	A	B	C
0	10.36 %	15.78 %	18.70 %
1	25.24 %	27.64 %	28.61 %
2	22.95 %	28.51 %	29.46 %
3	17.50 %	29.46 %	29.40 %
4	23.07 %	28.44 %	29.20 %
5	20.48 %	29.36 %	29.69 %
6	25.60 %	28.12 %	28.24 %
7	15.51 %	28.06 %	28.28 %
8	23.90 %	28.14 %	27.87 %
9	25.12 %	27.34 %	27.77 %
10	22.73 %	24.91 %	24.74 %
11	6.32 %	5.38 %	11.94 %

Cuadro XV.35: Concentraciones ( $x$ ) de las tomas realizadas en la destilación EtOH 2

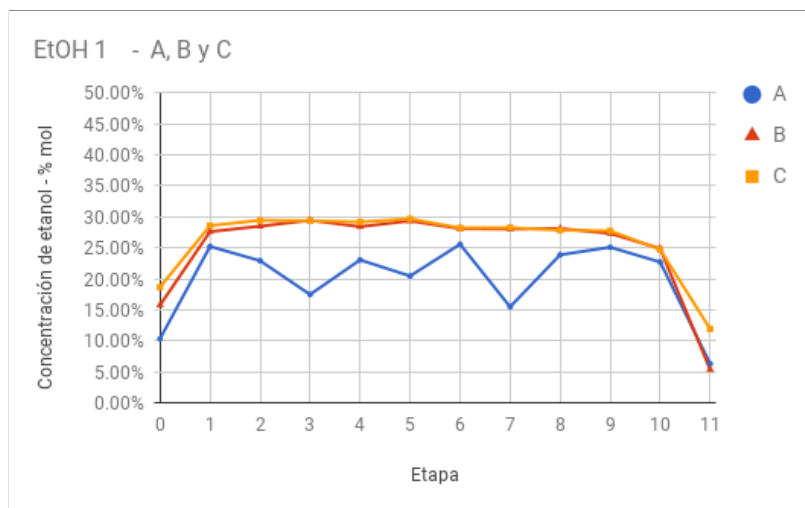
Muestra	A	B	C
0	28.61 %	28.51 %	28.38 %
1	30.30 %	30.95 %	30.71 %
2	30.64 %	31.19 %	31.19 %
3	31.39 %	30.41 %	31.55 %
4	30.85 %	31.55 %	31.55 %
5	31.36 %	30.95 %	30.00 %
6	27.37 %	25.01 %	16.32 %
7	25.12 %	22.07 %	16.87 %
8	19.52 %	10.82 %	8.41 %
9	9.67 %	8.74 %	7.42 %
10	16.00 %	12.74 %	8.59 %
11	1.64 %	1.21 %	0.71 %

Cuadro XV.36: Concentraciones ( $x$ ) de las tomas realizadas en la destilación EtOH 3

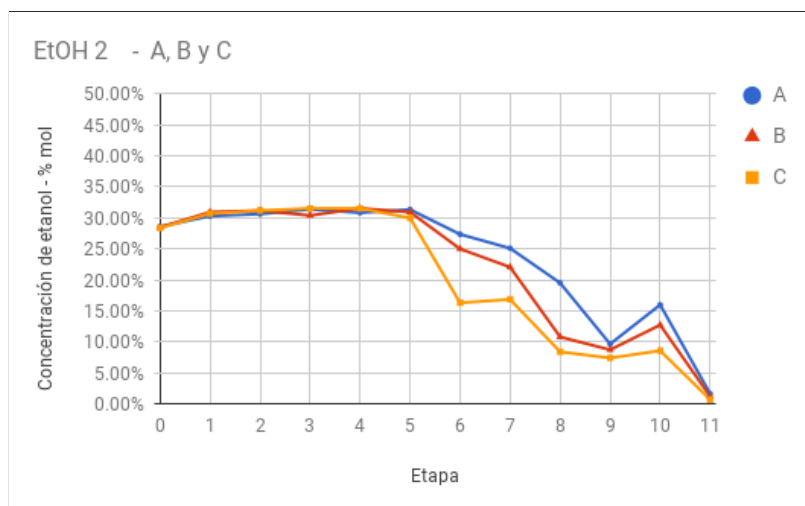
Muestra	A	B	C
0	41.94 %	41.72 %	41.58 %
1	35.78 %	36.92 %	36.21 %
2	21.65 %	24.54 %	25.63 %
3	4.06 %	5.39 %	9.81 %
4	4.67 %	2.17 %	2.49 %
5	2.38 %	2.25 %	1.98 %
6	1.67 %	1.77 %	1.37 %
7	2.90 %	1.60 %	1.75 %
8	2.48 %	3.02 %	1.98 %
9	1.43 %	0.78 %	0.91 %
10	3.32 %	1.23 %	1.93 %
11	1.15 %	0.05 %	0.33 %

Figura XV.12: Concentraciones ( $x$ ) en las destilaciones etanol-agua

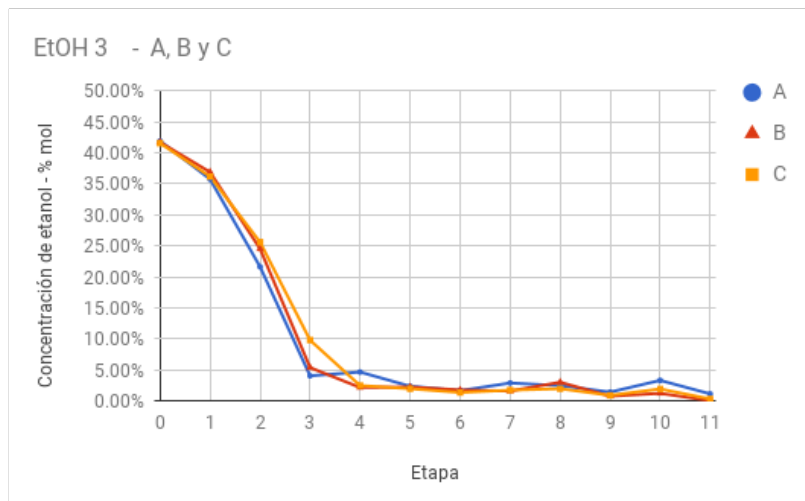
(a) EtOH 1



(b) EtOH 2



(c) EtOH 3



Cuadro XV.37: Concentraciones de acuerdo a las temperaturas de los platos

	MetOH 2		
	A	B	C
1	63.0	62.4	61.9
2	62.8	62.2	61.7
3	62.8	62.5	62.1
4	63.3	63.0	62.6
5	*	*	*
6	64.0	63.9	63.5
7	58.5	64.0	99.86 %
8	68.4	66.1	85.91 %
9	*	*	*
10	91.6	93.3	4.05 %
			93.5
			3.92 %

En azul se presentan las temperaturas por debajo de la menor temperatura del equilibrio (63.98°C). En rojo las temperaturas por encima de la mayor temperatura del equilibrio (99.38°C) y en verde las temperaturas intermedias.

\* Valores faltantes por estar desconectadas las termocuplas.

	EtOH 1			EtOH 2			EtOH 3		
	A	B	C	A	B	C	A	B	C
1	-	74.3	74.1	74.5	73.8	73.8	76.3	76.0	75.9
2	-	74.2	74.3	74.5	74.0	74.0	77.6	76.8	77.3
3	-	74.7	74.9	73.9	73.6	73.4	83.5	81.6	88.0
4	-	75.2	75.5	75.7	75.7	76.1	91.1	90.7	90.0
5	-	75.4	75.8	76.5	77.6	77.6	92.3	92.7	90.2
6	-	76.1	76.4	77.2	79.5	50.59 %	92.3	93.7	90.9
7	-	75.1	75.1	77.5	80.6	36.89 %	91.3	92.7	90.0
8	-	75.8	76.2	82.3	22.76 %	82.7	92.0	93.5	89.4
9	-	97.0	98.2	108.0	107.0	107.0	108.0	109.0	110.0
10	-	93.1	93.5	104.0	105.0	108.0	102.0	104.0	106.0

En azul se presentan las temperaturas por debajo de la menor temperatura del equilibrio (78.57°C). En rojo las temperaturas por encima de la mayor temperatura del equilibrio (100.00°C) y en verde las temperaturas intermedias.

- Datos no tomados durante la experimentación.

## 2. Eficiencia de los platos

Con base en las concentraciones del líquido en cada plato se obtuvo la eficiencia de Murphree del líquido para cada uno de ellos. Se obtuvieron destilaciones negativas debido a que los flujos de líquido y vapor no fueron iguales en cada plato.

Cuadro XV.38: Eficiencia del líquido en los platos - MetOH 1

Etapa	A	B	C
1	*	171.82 %	33.00 %
2	*	-147.54 %	-19.42 %
3	*	29.46 %	3.66 %
4	*	60.43 %	6.31 %
5	*	-24.88 %	2.60 %
6	*	-11.86 %	13.42 %
7	30.01 %	26.71 %	5.16 %
8	-49.16 %	-38.75 %	-17.31 %
9	-46.09 %	24.73 %	43.55 %
10	40.26 %	57.23 %	62.52 %
11	113.79 %	117.60 %	120.94 %

\* Eficiencia no disponible por falta de datos de concentración del líquido.

Cuadro XV.39: Eficiencia del líquido en los platos - MetOH 2

Etapa	A	B	C
1	-0.67 %	9.05 %	-52.28 %
2	18.39 %	-11.39 %	-4.17 %
3	10.18 %	-0.54 %	3.38 %
4	-56.34 %	-14.50 %	1.30 %
5	48.58 %	5.59 %	-8.00 %
6	19.11 %	32.86 %	42.70 %
7	*	53.94 %	41.98 %
8	*	12.24 %	45.06 %
9	*	*	*
10	*	*	*
11	*	*	*

\* Eficiencia no disponible por falta de datos de concentración del líquido.

Cuadro XV.40: Eficiencia del líquido en los platos - EtOH 1

Etapa	A	B	C
1	-169.95 %	-88.99 %	-63.37 %
2	11.05 %	-3.85 %	-3.67 %
3	28.73 %	-4.10 %	0.27 %
4	-37.94 %	4.26 %	0.83 %
5	13.61 %	-3.97 %	-2.08 %
6	-30.09 %	5.22 %	6.01 %
7	47.93 %	0.24 %	-0.14 %
8	-64.04 %	-0.37 %	1.74 %
9	-6.17 %	3.48 %	0.46 %
10	11.53 %	10.84 %	13.31 %
11	87.28 %	95.20 %	62.83 %

Cuadro XV.41: Eficiencia del líquido en los platos - EtOH 2

Etapa	A	B	C
1	-7.27 %	-10.50 %	-10.08 %
2	-1.39 %	-0.96 %	-1.92 %
3	-3.03 %	3.12 %	-1.44 %
4	2.16 %	-4.66 %	0.00 %
5	-2.05 %	2.36 %	6.12 %
6	15.78 %	23.76 %	56.22 %
7	10.05 %	14.29 %	-3.95 %
8	27.07 %	61.54 %	59.55 %
9	60.47 %	22.74 %	13.90 %
10	-77.41 %	-54.22 %	-18.62 %
11	106.21 %	107.16 %	108.57 %

Cuadro XV.42: Eficiencia del líquido en los platos - EtOH 3

Etapa	A	B	C
1	19.1 %	15.0 %	16.8 %
2	49.7 %	42.5 %	36.9 %
3	98.0 %	94.7 %	75.1 %
4	-17.7 %	70.7 %	88.4 %
5	58.0 %	-4.4 %	24.0 %
6	35.5 %	25.1 %	36.5 %
7	-87.9 %	11.4 %	-32.5 %
8	17.3 %	-104.8 %	-15.9 %
9	49.9 %	87.9 %	63.9 %
10	-156.4 %	-68.5 %	-132.5 %
11	77.5 %	113.3 %	98.3 %

### 3. Diagrama de McCabe-Thiele para cada destilación realizada

A continuación se presentan los diagramas en los cuales se grafican las concentraciones obtenidas tal y como se harían en un escalonado según el método de McCabe-Thiele. En algunas destilaciones y por sectores se logra apreciar un diagrama adecuado, sin embargo, en la mayoría de los casos el diagrama pareciera tener menos de once etapas. Esto debido a que, como las concentraciones obtenidas en la experimentación no disminuían de forma estable, aquellas concentraciones que aumentaban fueron sustituidas por la concentración de la etapa anterior lo que disminuye el número de etapas. El comportamiento obtenido en las concentraciones experimentales se debió a que muchas de las suposiciones del método no se cumplieron en la experimentación.

Figura XV.13: Diagrama de McCabe-Thiele, MetOH 1

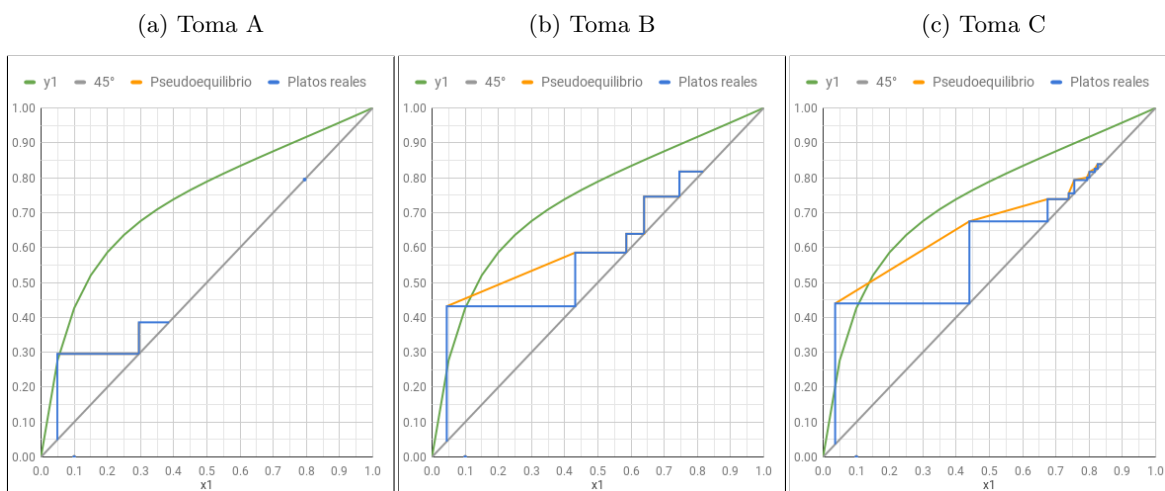


Figura XV.14: Diagrama de McCabe-Thiele, MetOH 2

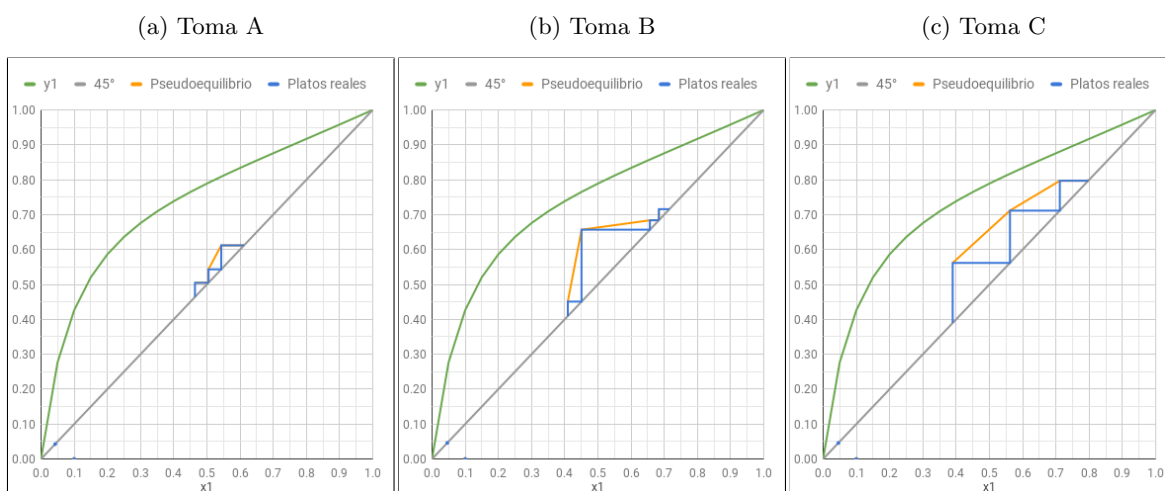


Figura XV.15: Diagrama de McCabe-Thiele, EtOH 1

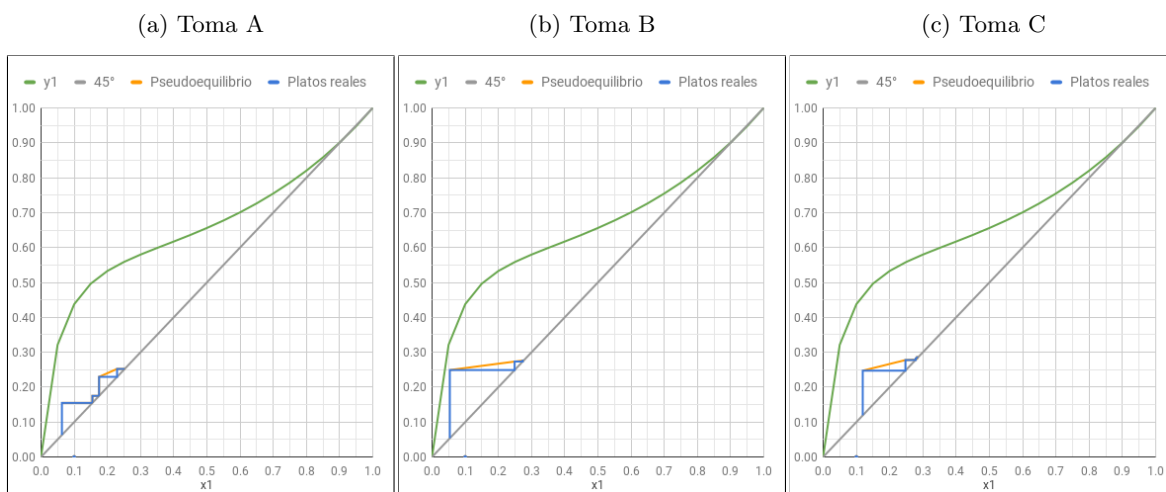


Figura XV.16: Diagrama de McCabe-Thiele, EtOH 2

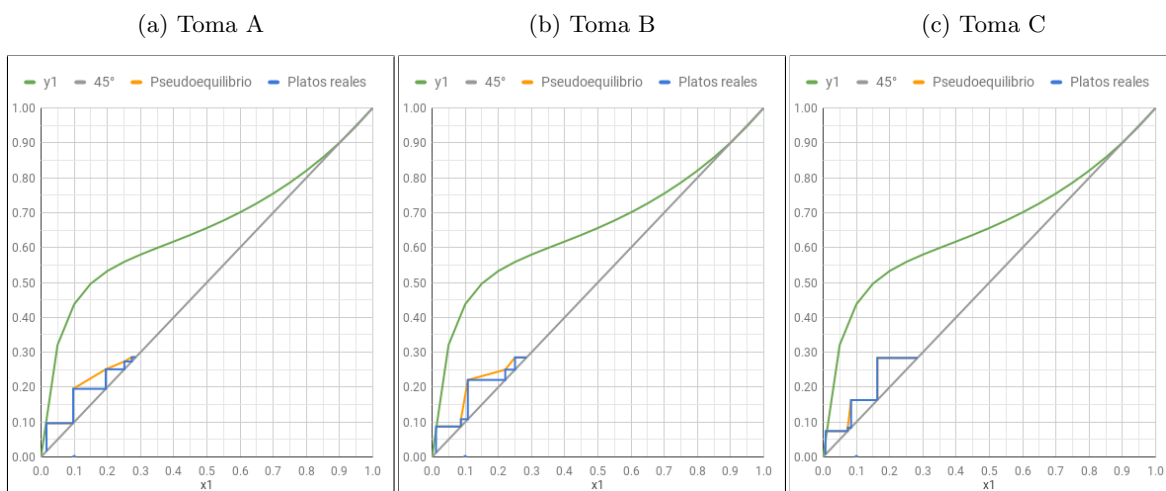
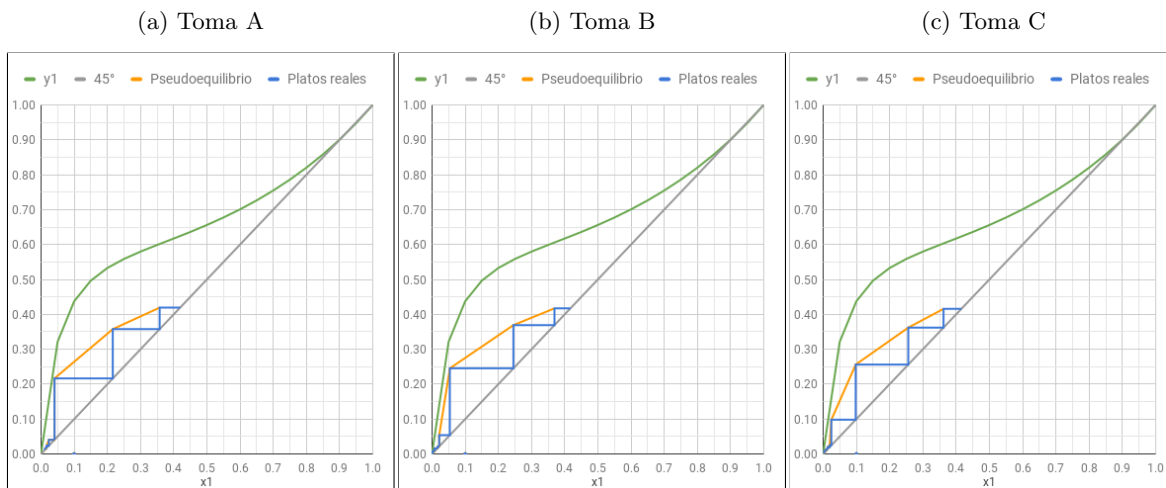


Figura XV.17: Diagrama de McCabe-Thiele, EtOH 3



A continuación se presentan las concentraciones utilizadas para realizar los diagramas. Como se explica en la sección *Cálculos de muestra*, las concentraciones que aumentaban al bajar en la torre, en vez de disminuir, fueron sustituidas por la concentración de la etapa superior. Esto se realizó para que las etapas en los diagramas no regresaran generando líneas incesarias en el gráfico y obtener gráficos más pulidos.

Cuadro XV.43: Datos para los gráficos McCabe-Thiele de las destilaciones metanol-agua

Etapa	MetOH 1			MetOH 2		
	A	B	C	A	B	C
0	79.49 %	81.77 %	83.92 %	61.20 %	71.60 %	79.80 %
1	*	81.77 %	83.92 %	61.20 %	68.39 %	79.80 %
2	*	81.77 %	82.58 %	54.33 %	68.39 %	79.80 %
3	*	74.58 %	81.68 %	50.49 %	68.39 %	79.80 %
4	*	74.58 %	80.07 %	50.49 %	68.39 %	79.71 %
5	*	63.92 %	79.35 %	50.49 %	68.39 %	79.71 %
6	38.59 %	63.92 %	75.54 %	46.41 %	65.69 %	71.17 %
7	29.54 %	58.56 %	73.87 %	*	45.09 %	56.18 %
8	29.54 %	58.56 %	73.87 %	*	40.93 %	38.97 %
9	29.54 %	58.56 %	67.51 %	*	*	*
10	29.54 %	43.17 %	43.98 %	*	*	*
11	4.88 %	4.43 %	3.64 %	4.26 %	4.60 %	4.58 %

\* nD por fuera del rango correspondiente a una solución metanol-agua.

Cuadro XV.44: Datos para los gráficos McCabe-Thiele de las destilaciones etanol-agua

Etapa	EtOH 1			EtOH 2			EtOH 3		
	A	B	C	A	B	C	A	B	C
0	25.24 %	27.64 %	28.61 %	28.61 %	28.51 %	28.38 %	41.94 %	41.72 %	41.58 %
1	25.24 %	27.64 %	28.61 %	28.61 %	28.51 %	28.38 %	35.78 %	36.92 %	36.21 %
2	22.95 %	27.64 %	28.61 %	28.61 %	28.51 %	28.38 %	21.65 %	24.54 %	25.63 %
3	17.50 %	27.64 %	28.61 %	28.61 %	28.51 %	28.38 %	4.06 %	5.39 %	9.81 %
4	17.50 %	27.64 %	28.61 %	28.61 %	28.51 %	28.38 %	4.06 %	2.17 %	2.49 %
5	17.50 %	27.64 %	28.61 %	28.61 %	28.51 %	28.38 %	2.38 %	2.17 %	1.98 %
6	17.50 %	27.64 %	28.24 %	27.37 %	25.01 %	16.32 %	1.67 %	1.77 %	1.37 %
7	15.51 %	27.64 %	28.24 %	25.12 %	22.07 %	16.32 %	1.67 %	1.60 %	1.37 %
8	15.51 %	27.64 %	27.87 %	19.52 %	10.82 %	8.41 %	1.67 %	1.60 %	1.37 %
9	15.51 %	27.34 %	27.77 %	9.67 %	8.74 %	7.42 %	1.43 %	0.78 %	0.91 %
10	15.51 %	24.91 %	24.74 %	9.67 %	8.74 %	7.42 %	1.43 %	0.78 %	0.91 %
11	6.32 %	5.38 %	11.94 %	1.64 %	1.21 %	0.71 %	1.15 %	0.05 %	0.33 %

## 4. Eficiencia del líquido según la hoja desarrollada

Se obtienen los promedios de  $x_F$ ,  $x_D = x_{L_0}$  y  $x_W$  y estos valores se ingresaron en el simulador para obtener las eficiencias mostradas. En la sección de *Resultados* se muestran las gráficas obtenidas.

Cuadro XV.45: Resumen de las concentraciones de alimentación

	MetOH1	MetOH2	EtOH 1	EtOH 2	EtOH 3
A	6.42 %	6.28 %	4.22 %	2.21 %	2.19 %
B	6.27 %	7.11 %	4.12 %	2.31 %	2.17 %
C	6.40 %	6.49 %	4.21 %	2.23 %	2.17 %
<b>Promedio</b>	<b>6.36 %</b>	<b>6.63 %</b>	<b>4.18 %</b>	<b>2.25 %</b>	<b>2.18 %</b>
Desviación Estándar	0.08 %	0.43 %	0.05 %	0.05 %	0.01 %

Cuadro XV.46: Resumen de las concentraciones de destilado ( $x_D = x_{L_0}$ )

	MetOH1	MetOH2	EtOH 1	EtOH 2	EtOH 3
A	79.49 %	61.20 %	25.24 %	28.61 %	41.94 %
B	81.77 %	71.60 %	27.64 %	28.51 %	41.72 %
C	83.92 %	59.58 %	28.61 %	28.38 %	41.58 %
<b>Promedio</b>	<b>81.73 %</b>	<b>64.13 %</b>	<b>27.16 %</b>	<b>28.50 %</b>	<b>41.75 %</b>
Desviación estándar	2.22 %	6.52 %	1.73 %	0.12 %	0.18 %

Cuadro XV.47: Resumen de las concentraciones de residuo

	MetOH1	MetOH2	EtOH 1	EtOH 2	EtOH 3
A	4.88 %	4.26 %	6.32 %	1.64 %	1.15 %
B	4.43 %	4.60 %	5.38 %	1.21 %	0.05 %
C	3.64 %	4.58 %	11.94 %	0.71 %	0.33 %
<b>Promedio</b>	<b>4.32 %</b>	<b>4.48 %</b>	<b>7.88 %</b>	<b>1.19 %</b>	<b>0.51 %</b>
Desviación estándar	0.62 %	0.19 %	3.54 %	0.47 %	0.57 %

Cuadro XV.48: Eficiencia del líquido de acuerdo al simulador

	MetOH 1	MetOH 2	EtOH 1	EtOH 2	EtOH 3
$x_D$	81.73 %	64.13 %	27.16 %	28.50 %	41.75 %
$x_F$	6.36 %	6.63 %	4.18 %	2.25 %	2.18 %
$x_W$	4.32 %	4.48 %	7.88 %	1.19 %	0.51 %
$N_p$ reales	11	11	11	11	11
$N_p$ según simulador	3	3	1	2	3
$E_o$	27.27 %	27.27 %	9.09 %	18.18 %	27.27 %
$E_{ML}$ según simulador	32.60 %	27.50 %	13.30 %	30.00 %	38.50 %

## 5. Balance de masa y energía

## a. Flujo de agua en el condensador y flujo de condensados en el calderín

Cuadro XV.49: Flujo de vapor condensado, destilaciones metanol-agua

Muestra	MetOH 1	MetOH 2
1 (mL/s)	3.67	2.89
2	3.29	3.88
3	3.43	1.07
<b>Promedio (mL/s)</b>	<b>3.46</b>	<b>2.62</b>
$\dot{m}$ (g/h)	12460.01	9419.81
$\dot{m}$ (mol/h)	691.65	522.89

Cuadro XV.50: Flujo de vapor condensado, destilaciones etanol-agua

Muestra	EtOH 1	EtOH 2	EtOH 3
1 (mL/s)	5.26	1.75	3.87
2 (mL/s)	3.40	1.78	2.78
3 (mL/s)	3.32	1.84	2.78
<b>Promedio (mL/s)</b>	<b>3.99</b>	<b>1.79</b>	<b>3.14</b>
$\dot{m}$ (g/h)	14365.04	6449.77	11319.41
$\dot{m}$ (mol/h)	797.39	358.02	628.33

Cuadro XV.51: Flujo de agua fría en el condensador

Muestra	Flujo de agua
1 (mL/s)	258.88
2 (mL/s)	208.70
3 (mL/s)	240.00
<b>Promedio</b>	<b>235.86</b>
Flujo de Agua (g/h)	849086.47
Flujo de Agua (mol/h)	47132.19

## b. Carga térmica del condensador y del rehervidor

Cuadro XV.52: Carga térmica del condensador para las destilaciones metanol-agua

	MetOH1	MetOH2
$\theta$ (h)	1.75	1.65
$T$ salida	*	299.55
$T$ entrada	*	296.42
$\Delta T$	**	3.13
$\dot{m}$ (mol/h)	47132.19	47132.19
$C_{pL}$ (J/mol K)	75.384	75.384
$\dot{Q}_c$ (J/h)	**	11,132,774.96
$Q_c$ (J)	**	18,369,078.68

\* Temperatura no disponible

\*\* Valor no calculado por falta de datos

Cuadro XV.53: Carga térmica del rehervidor para las destilaciones metanol-agua

	MetOH1	MetOH2
$\theta$	1.75	1.65
$\dot{m}$	691.65	522.89
$\lambda$ (@372.53K)	40827.43	40827.43
$\dot{Q}_b$ (J/h)	28,238,141.10	21,348,140.09
$Q_b$ (J)	49,416,746.92	35,224,431.15

Cuadro XV.54: Carga térmica del condensador para las destilaciones etanol-agua

	EtOH1	EtOH2	EtOH3
$\theta$ (h)	1.30	1.30	0.78
$T$ salida	299.7	296.3	300.5
$T$ entrada	295.9	294.8	298.0
$\Delta T$	3.75	1.50	2.57
$\dot{m}$ (mol/h)	47132.19	47132.19	47132.19
$C_{pL}$ (J/mol K)	75.384	75.384	75.384
$\dot{Q}_c$ (J/h)	13,323,799.81	5,329,519.93	9,119,400.76
$Q_c$ (J)	17,320,939.76	6,928,375.90	7,143,530.60

Cuadro XV.55: Carga térmica del rehervidor para las destilaciones etanol-agua

	EtOH1	EtOH2	EtOH3
$\theta$ (h)	1.30	1.30	0.78
$\dot{m}$	797.39	358.02	628.33
$\lambda$ (@372.53K)	40827.43	40827.43	40827.43
$\dot{Q}_b$ (J/h)	32,555,510.42	14,617,124.44	25,653,200.93
$Q_c$ (J)	42,322,163.55	19,002,261.77	20,095,007.39

## c. Solución inicial en cada destilación

Se obtiene la masa de solución alimentada a partir de la concentración de alcohol en la solución y de la densidad del alcohol tal y como se muestra en la sección *Cálculos de muestra*.

Cuadro XV.56: Cantidad de solución inicial en cada destilación

	MetOH1	MetOH2	EtOH 1	EtOH 2	EtOH 3
Volumen (L)	60	47.41	60	52.097	45.5
$x_f$	0.0636	0.0663	0.0418	0.0225	0.0218
$\rho_m$	0.9868	0.9862	0.9912	0.9953	0.9954
Masa (kg)	59.21	46.76	59.47	51.85	45.29

## XVI. ANEXO 4: PLANOS Y DIAGRAMAS

### A. Planos de la columna de destilación

Se realizó un modelo de la columna de destilación de platos el cual incluye: calderín, columna de rectificación, condensador y estructura metálica. El modelo se realizó de la forma más fiel posible a la columna real, de acuerdo con las respectivas mediciones. No se incluyeron en el modelo tuberías ni accesorios debido a la complejidad de estos. El modelo se presenta en las Figuras XVI.1 y XVI.2. En las páginas siguientes se presentan los planos correspondientes.

Figura XVI.1: Modelo en 3D de la columna de destilación

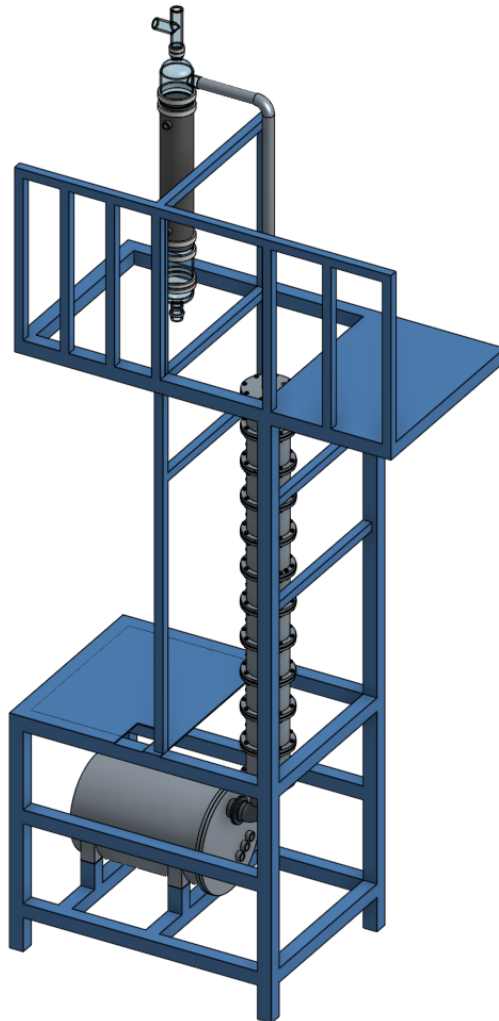
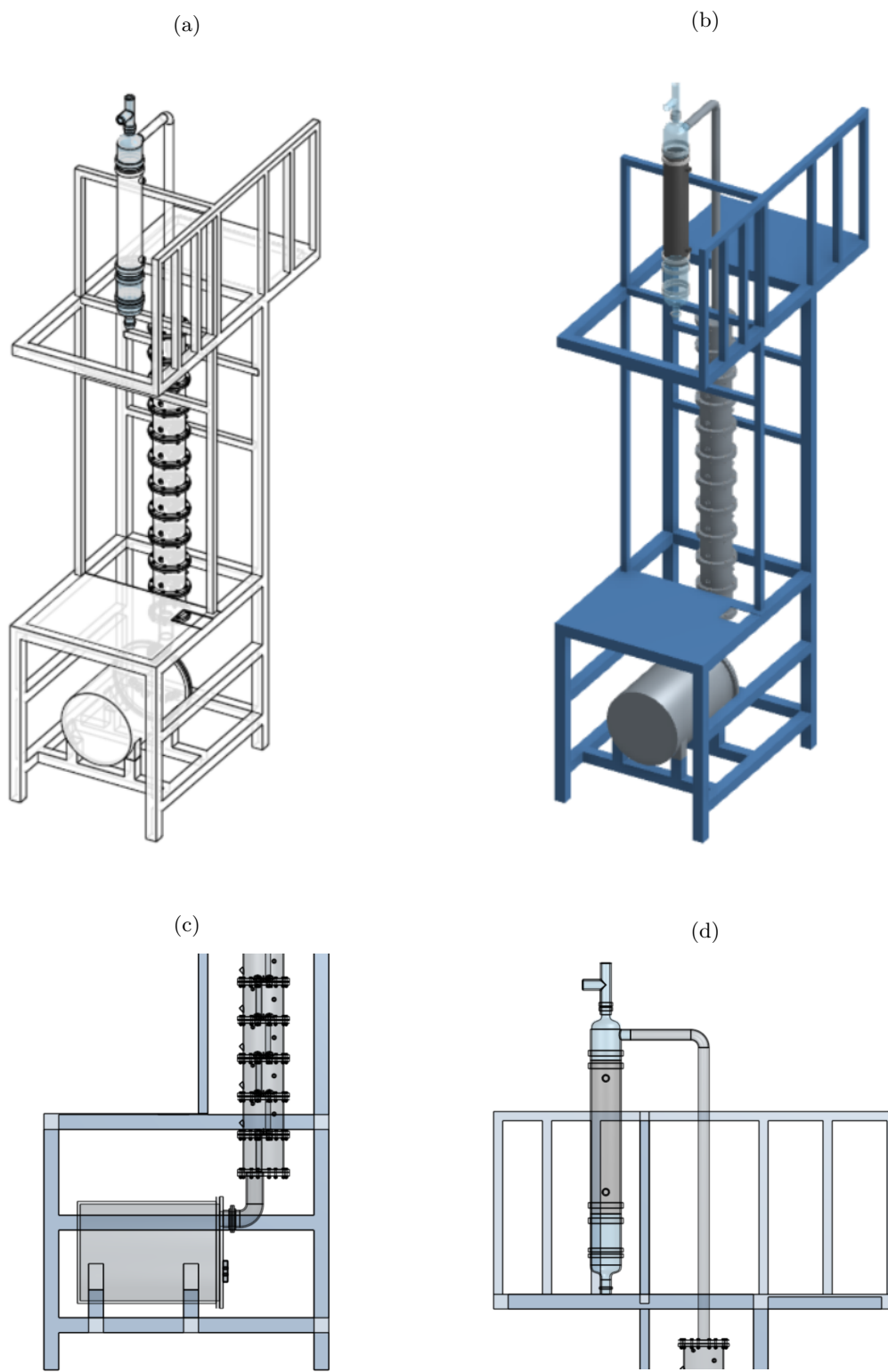
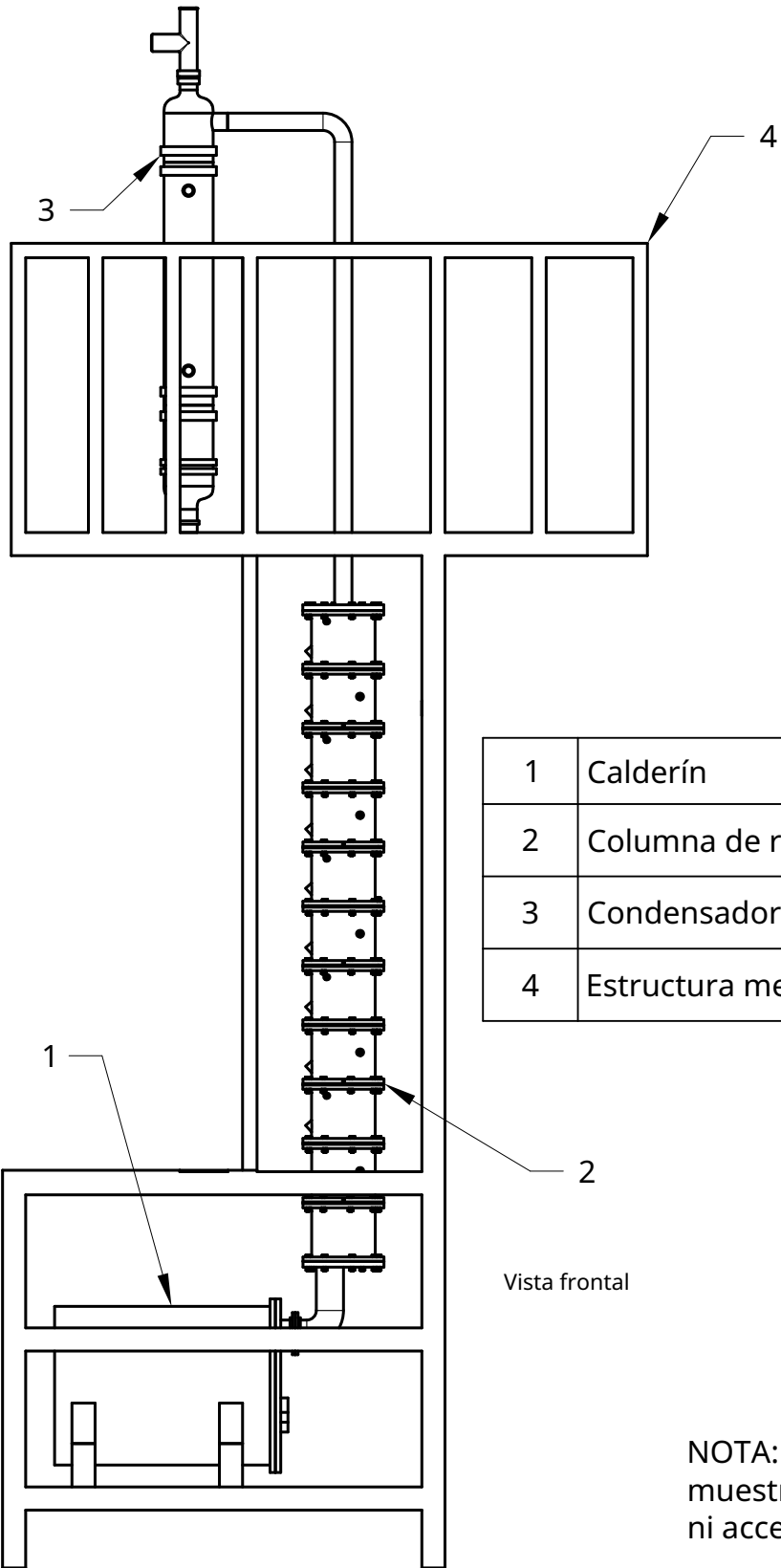


Figura XVI.2: Vistas del modelo en 3D de la columna de destilación


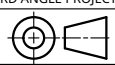


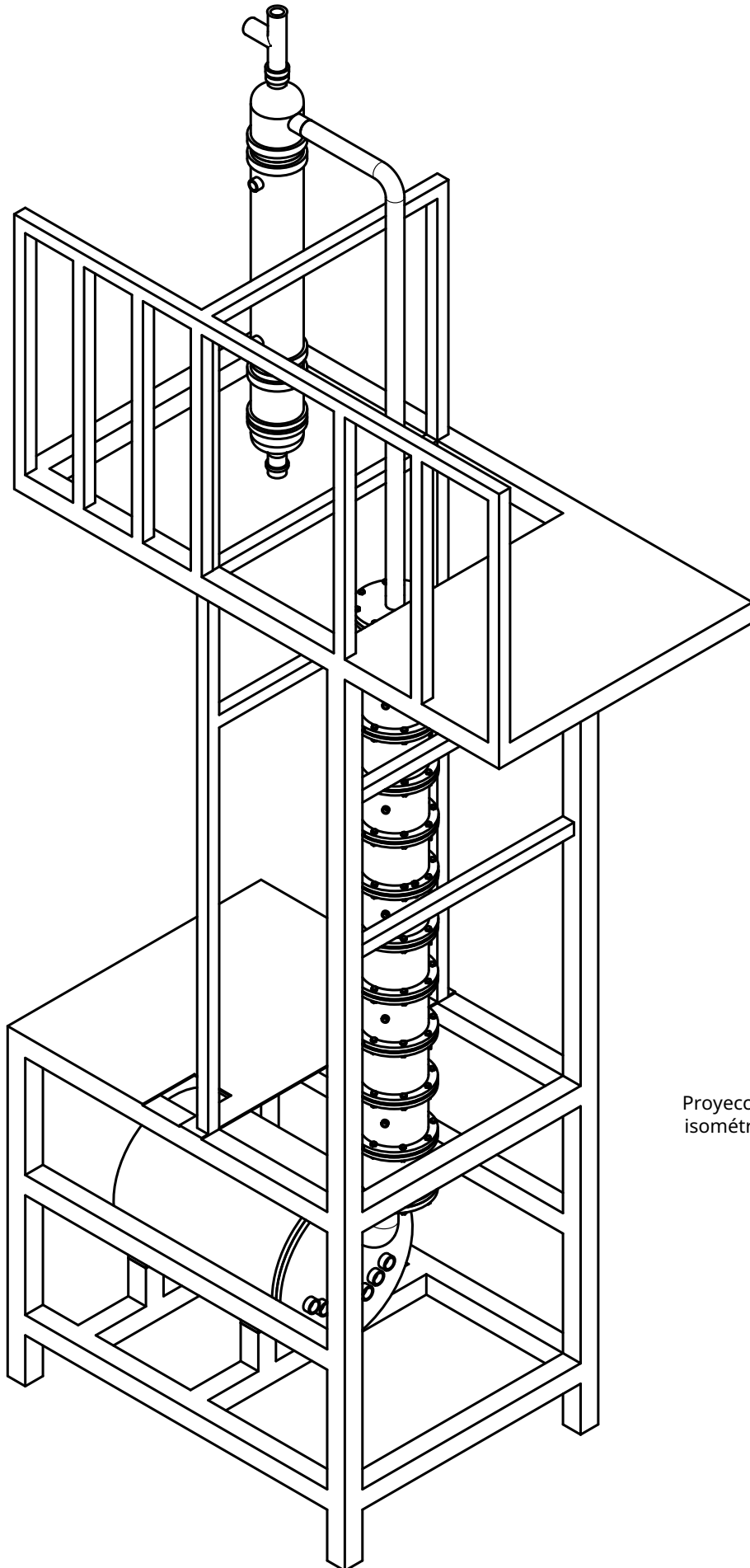


1	Calderín
2	Columna de rectificación
3	Condensador
4	Estructura metálica

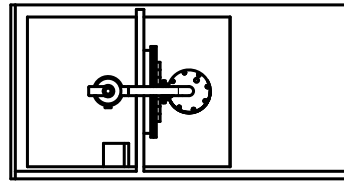
Vista frontal

NOTA: No se muestran tuberías ni accesorios

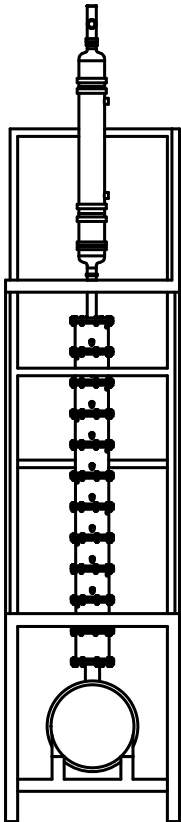
UNLESS OTHERWISE SPECIFIED, DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS  ANGULAR = ± °  SURFACE FINISH   DO NOT SCALE DRAWING  BREAK ALL SHARP EDGES AND REMOVE BURRS  THIRD ANGLE PROJECTION  	DRAWN	Abigail Xutuc	SIGNATURE	TITLE <b>Torre de destilación</b> Laboratorio de Operaciones Unitarias Universidad del Valle de Guatemala
	CHECKED	Ing. Cristián Rossi		
	APPROVED	Ing. Allan Cifuentes		
	MATERIAL	---	FINISH	---
				SIZE <b>A</b> DWG NO. <b>001</b> REV. <b>2</b> SCALE <b>0.04:1</b> WEIGHT --- SHEET <b>1 of 5</b>



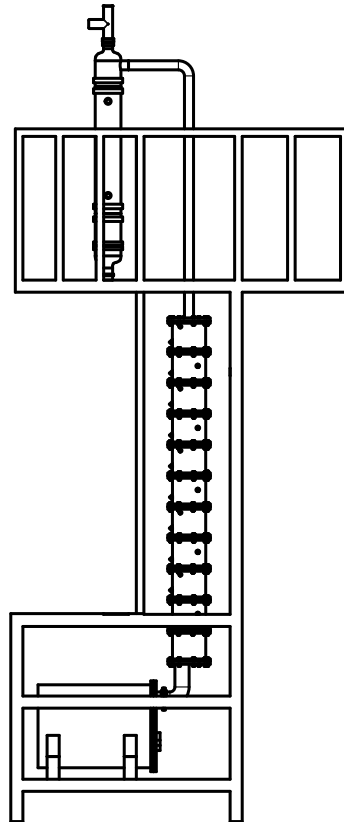
Proyección  
isométrica



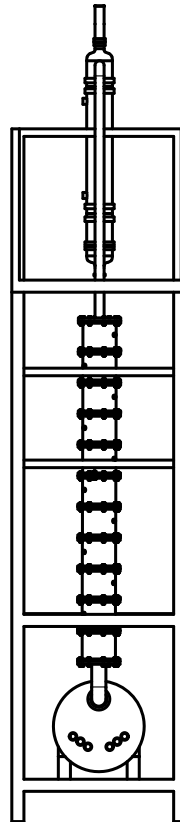
Vista superior



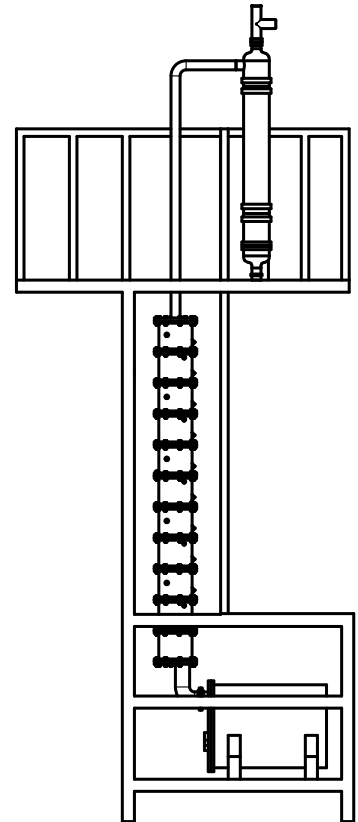
Vista lateral izquierda



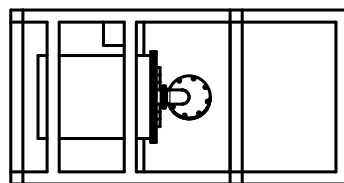
Vista frontal



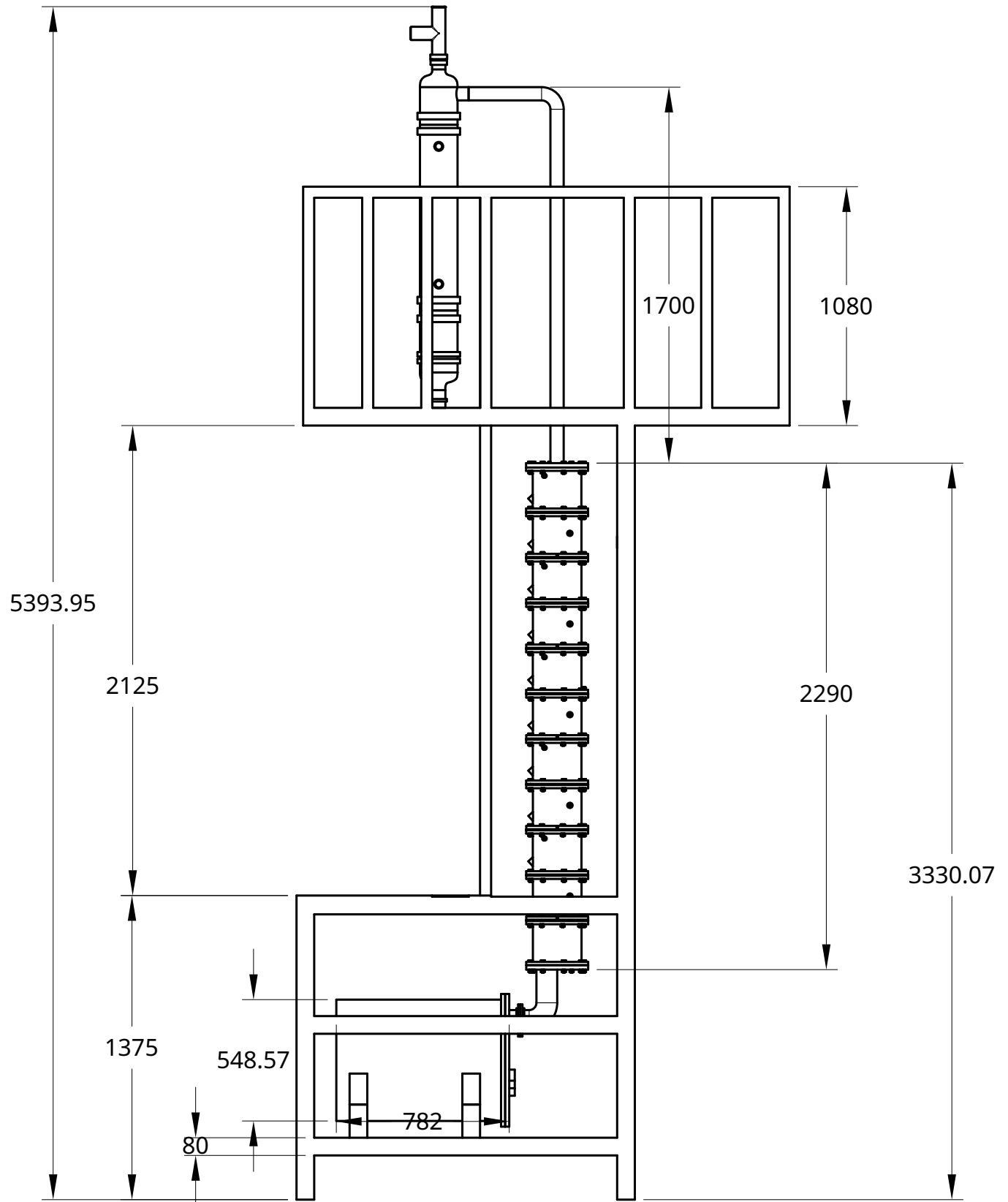
Vista lateral derecha



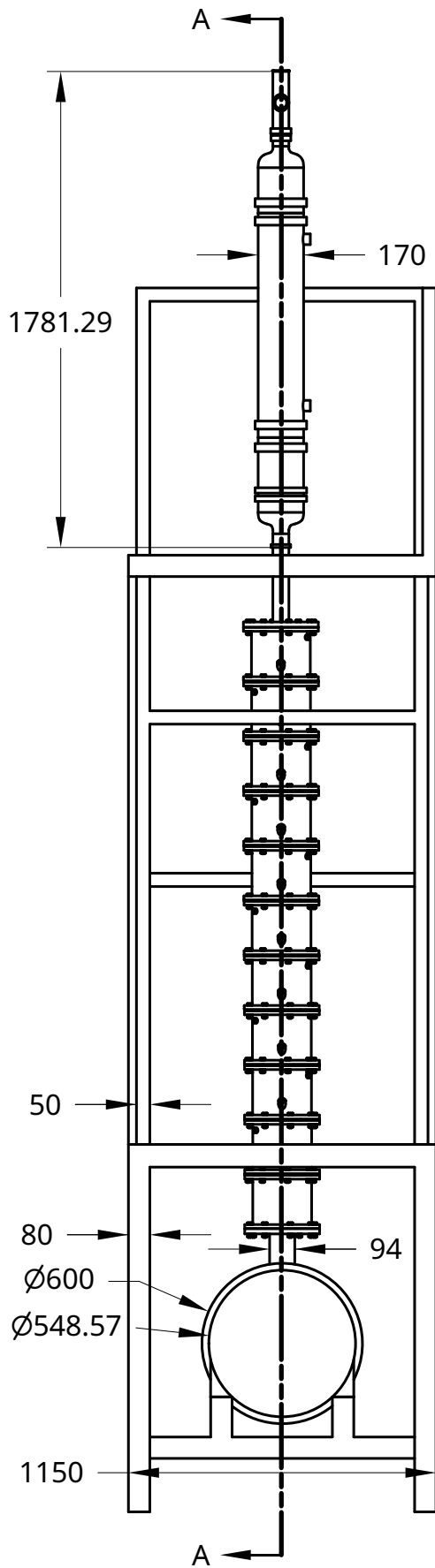
Vista posterior



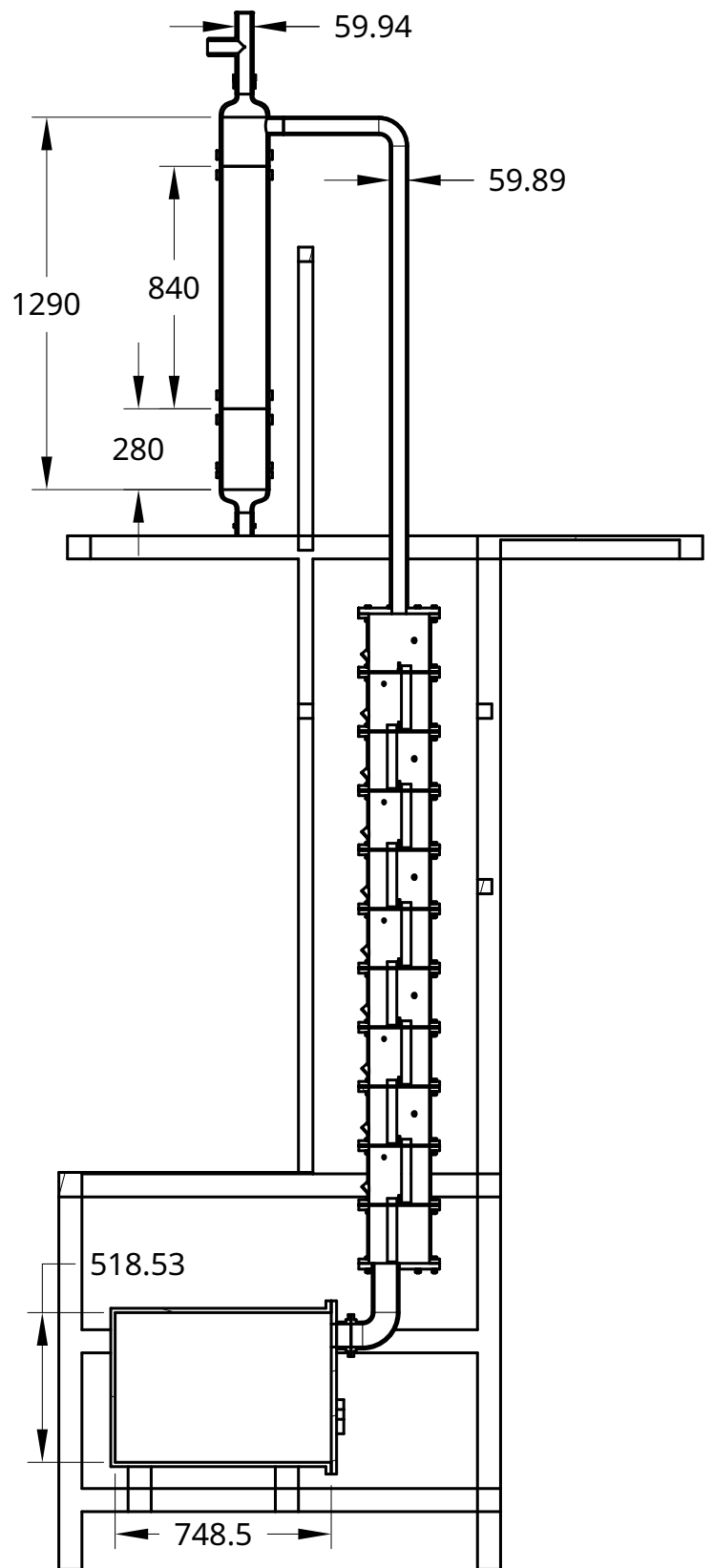
Vista inferior



Vista frontal



Vista lateral izquierda



Vista de sección A - A

## B. Planos de los platos de la columna de destilación

En las Figuras XVI.3 y XVI.4 se presenta el modelo 3D de los platos de campanas de burbujeo los cuales son piezas principales de la columna de rectificación. Se muestra un arreglo de dos platos ya que se tienen dos estructuras diferentes y estas deben ir de forma alternada para asegurar que el líquido se retenga en cada etapa antes de pasar a la siguiente. En las páginas siguientes se presentan los planos correspondientes.

Figura XVI.3: Modelo en 3D de un arreglo de dos platos

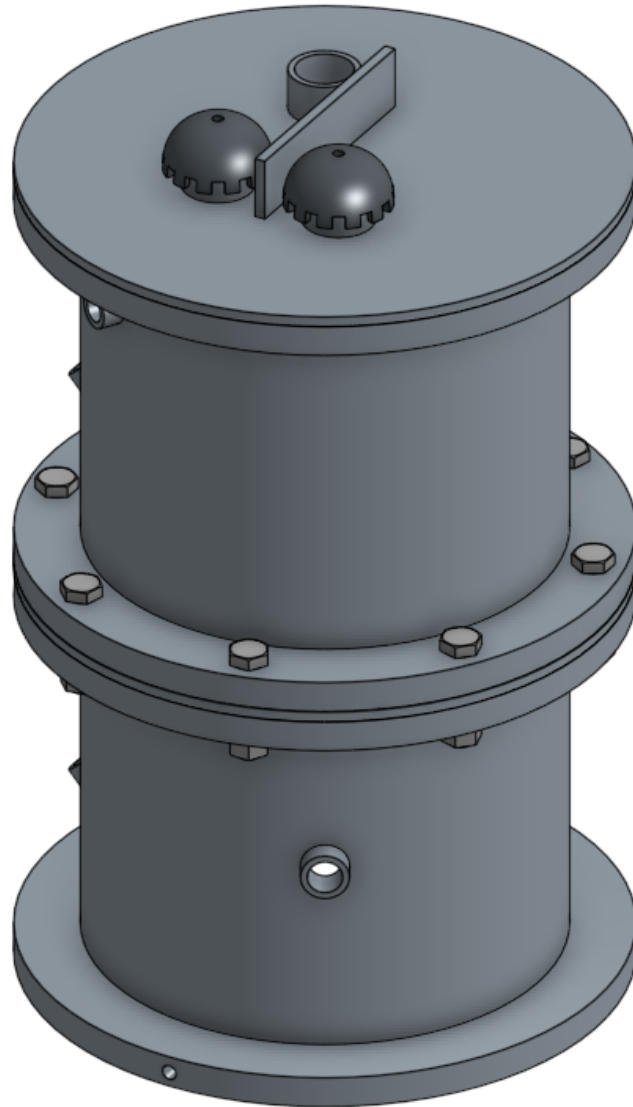
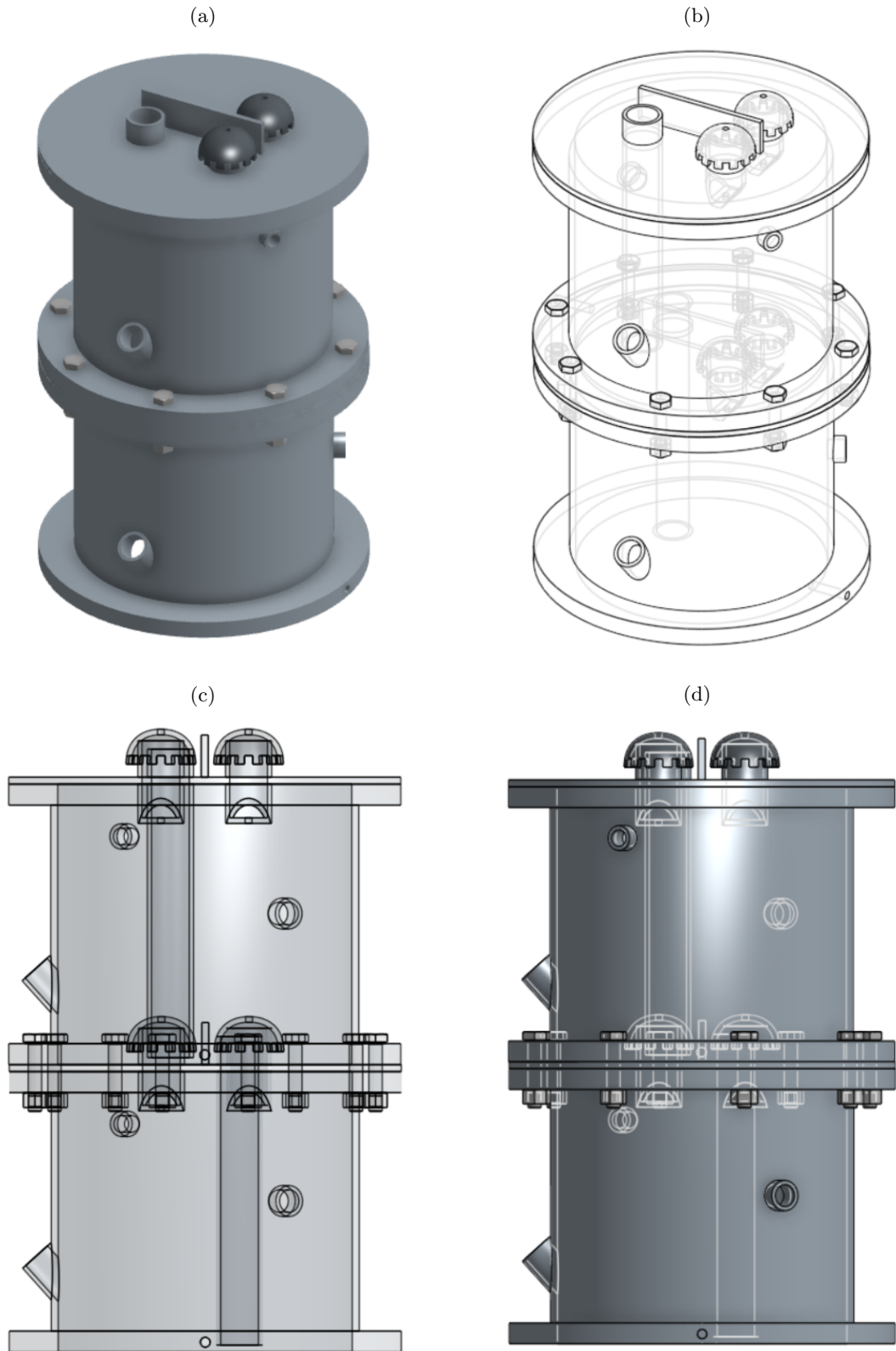
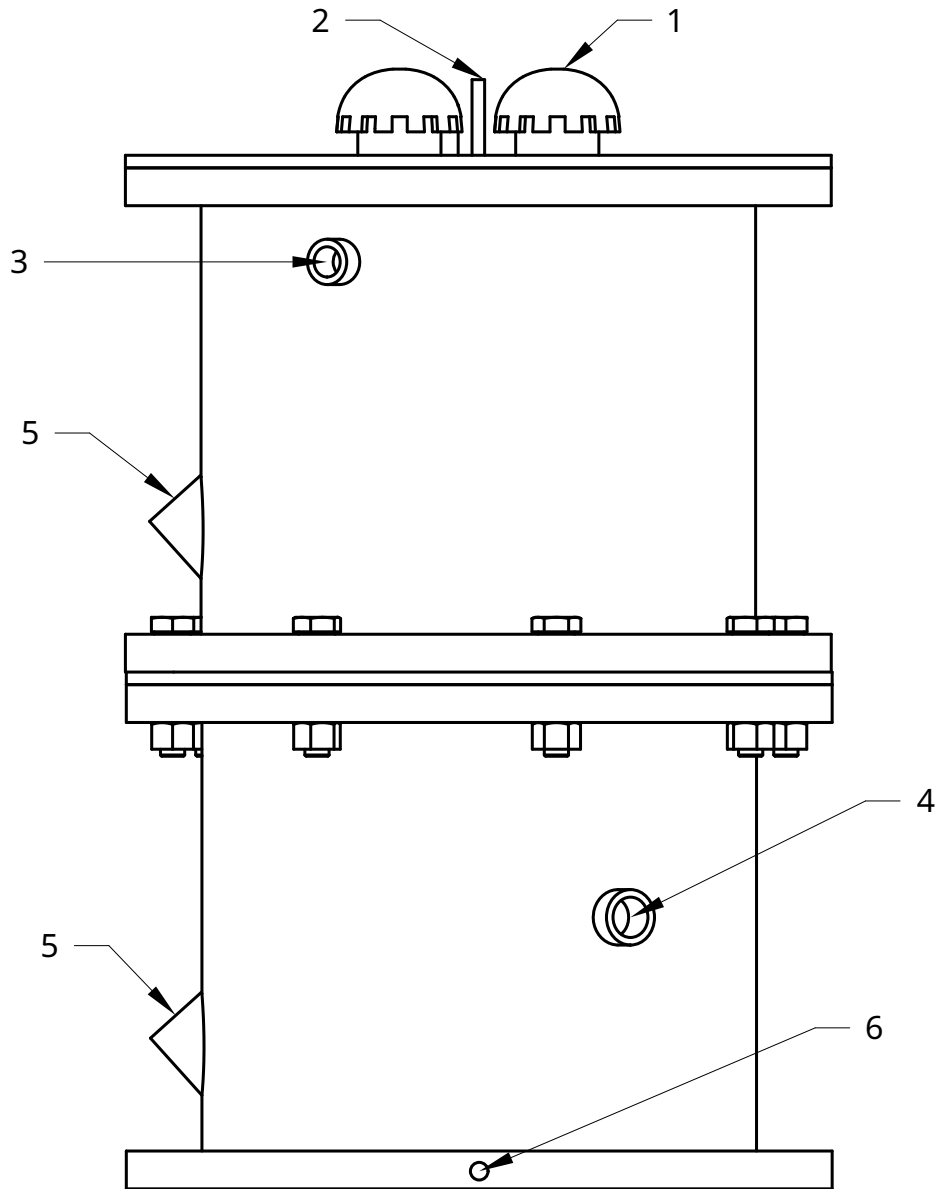




Figura XVI.4: Vistas del modelo en 3D de un arreglo de dos platos

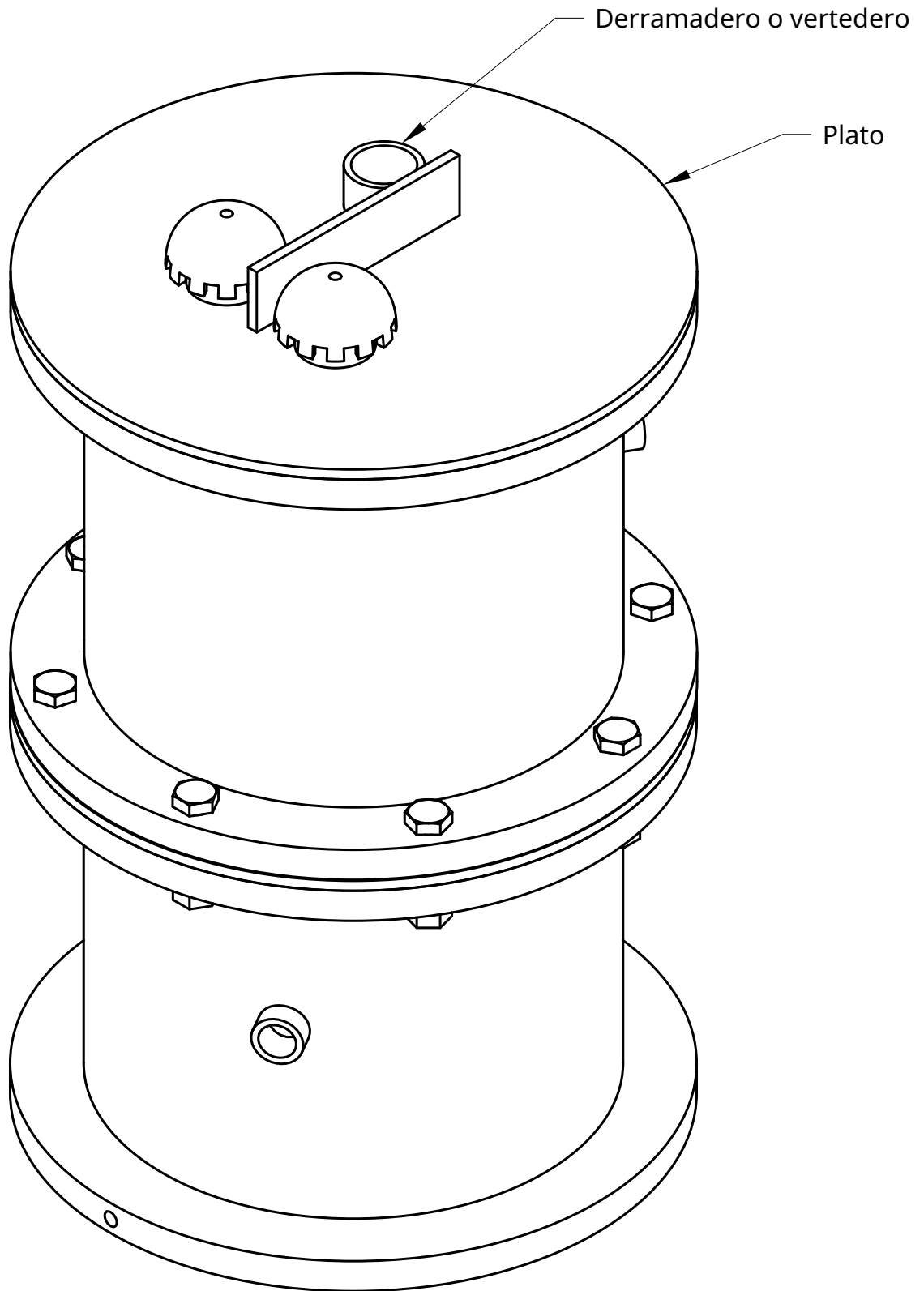


1	Campanas de burbujeo	4	Entrada de alimentación
2	Separador de flujo	5	Entrada para termocupla
3	Toma de muestra de vapor	6	Toma de muestra de líquido

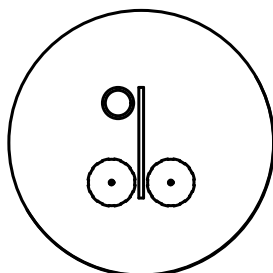


Vista frontal

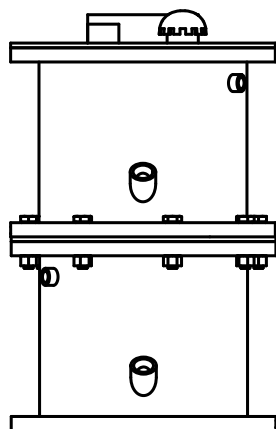
UNLESS OTHERWISE SPECIFIED, DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS  ANGULAR = ± °  SURFACE FINISH   DO NOT SCALE DRAWING  BREAK ALL SHARP EDGES AND REMOVE BURRS  THIRD ANGLE PROJECTION 	DRAWN	Abigail Xutuc	SIGNATURE	TITLE <b>Arreglo de dos platos</b> Laboratorio de Operaciones Unitarias Universidad del Valle de Guatemala
	CHECKED	Ing. Cristián Rossi		
	APPROVED	Ing. Allan Cifuentes		
	MATERIAL	---	FINISH	---
				SIZE <b>A</b>
				DWG NO. <b>002</b>
				REV. <b>2</b>
				SCALE <b>0.3333:1</b>
				WEIGHT ---
				SHEET <b>1 of 5</b>



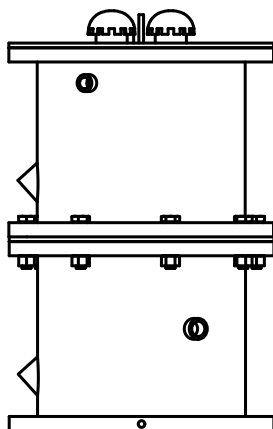
Proyección isométrica



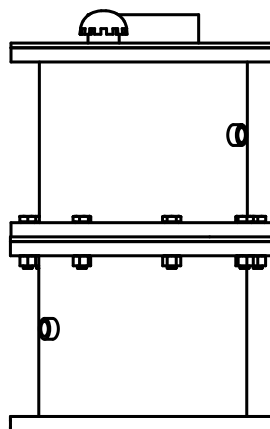
Vista superior



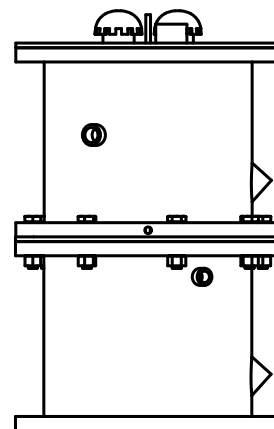
Vista lateral izquierda



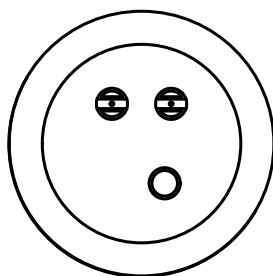
Vista frontal



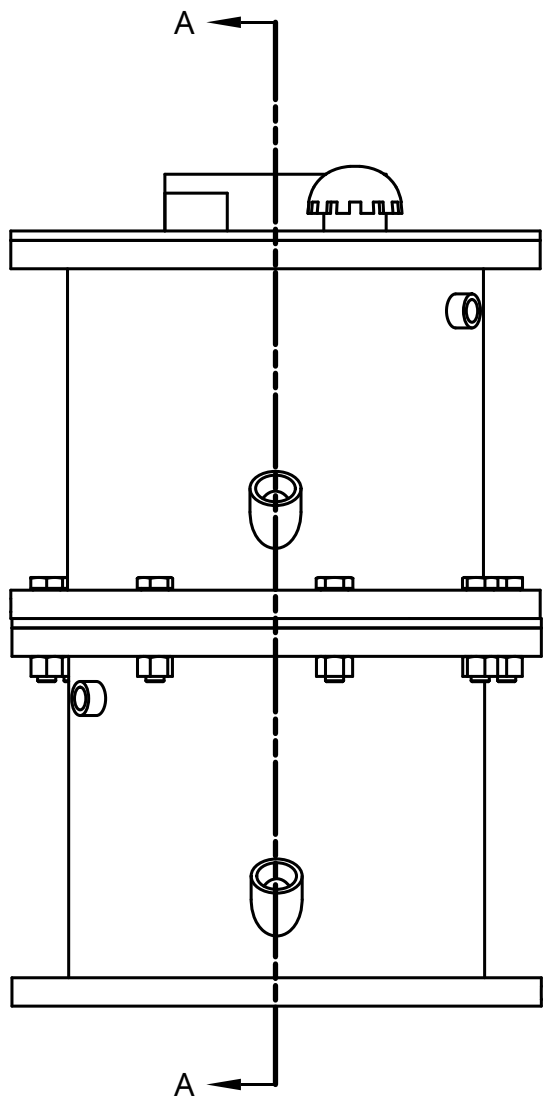
Vista lateral derecha



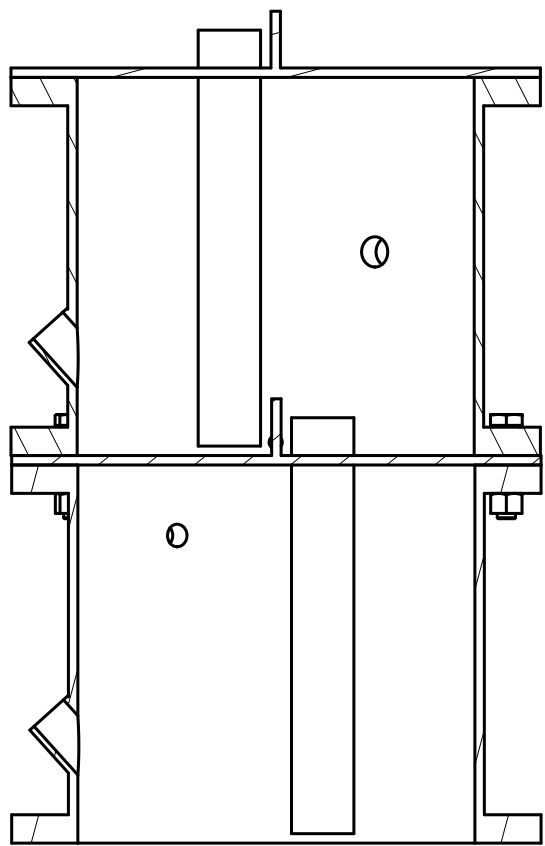
Vista posterior



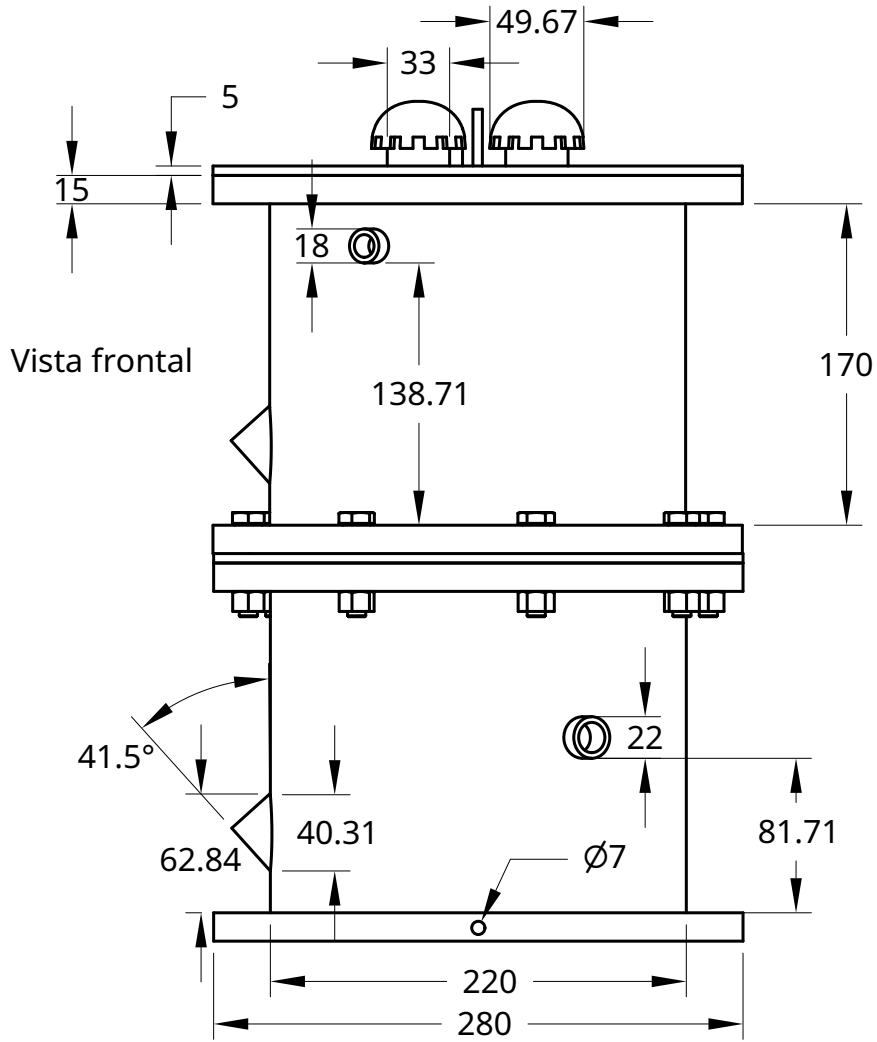
Vista inferior



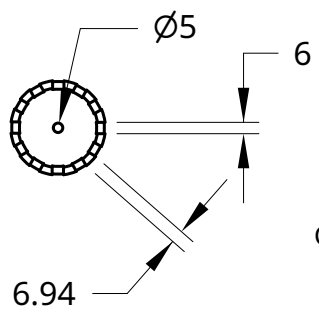
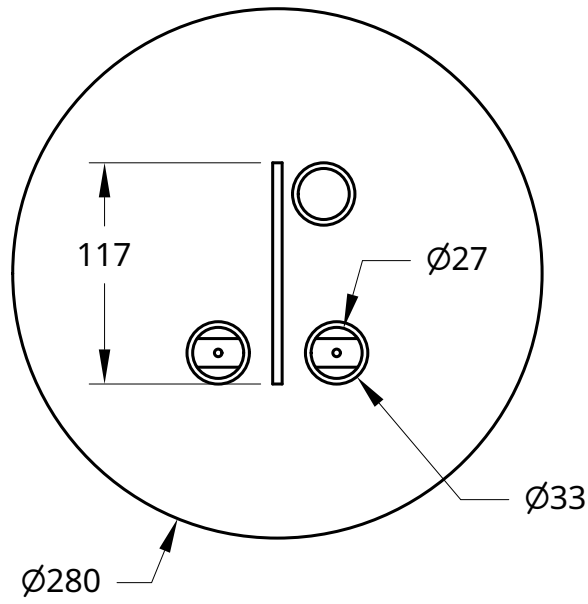
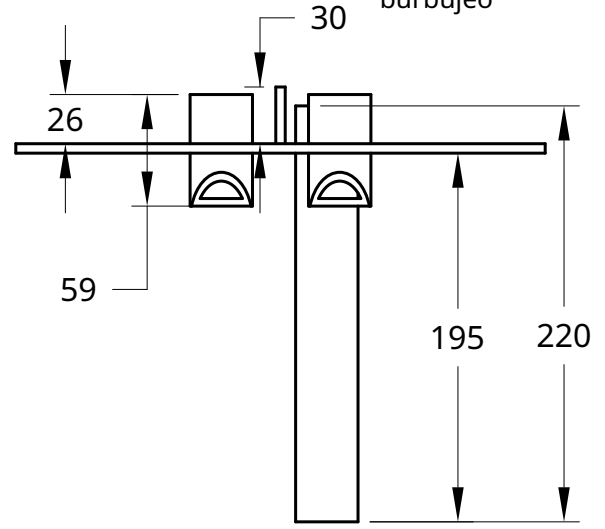
Vista lateral  
izquierda



Vista de  
sección  
A - A



Vista frontal  
Plato sin campanas de burbujeo



## C. Diagrama de tuberías e instrumentación (P&ID) de la columna de destilación

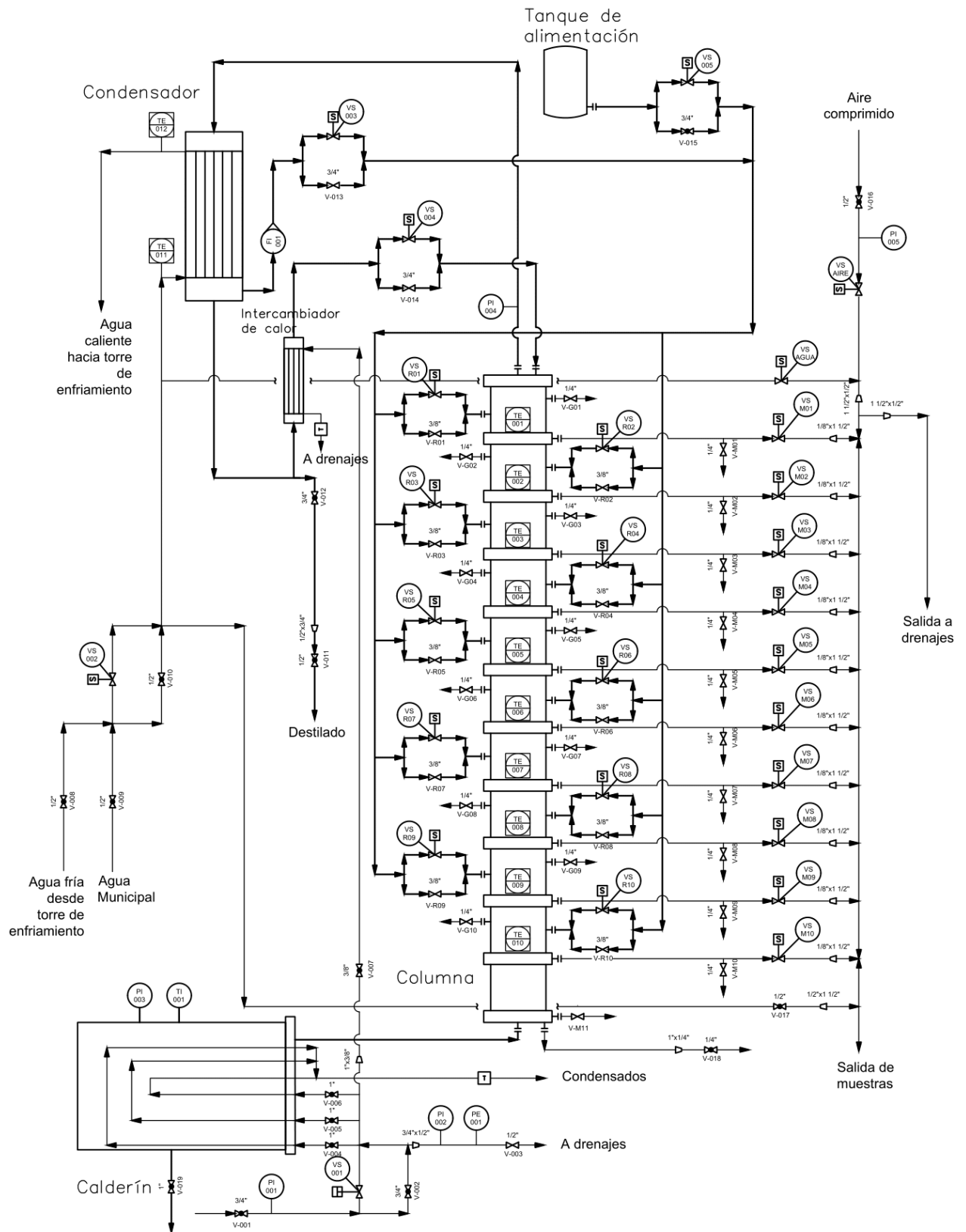
Se presenta a continuación el P&ID de la columna de destilación del Laboratorio de Operaciones Unitarias de la Universidad del Valle de Guatemala con la estructuración que posee al momento de realizar el presente trabajo. En el Cuadro XVI.1 se presenta la información de los instrumentos de medición instalados en la columna y en el Cuadro XVI.2 se presenta la información de las válvulas presentes. En la página siguiente al diagrama se muestra una captura de pantalla del software utilizado para controlar la columna de destilación. Este software brinda en tiempo real la temperatura de cada plato, la temperatura de entrada y salida del agua del condensador y la presión del vapor entrante. Desde este también se pueden controlar cada una de las válvulas electrónicas presentes.


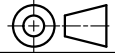
Cuadro XVI.1: Instrumentación de la columna de destilación

Código(s)	Tipo	Variable	Marca	Rango	Descripción
FI-001	Rotámetro	Flujo	Omega	-	Medidor de flujo del reciclaje
PE-001	Sensor de presión	Presión	SSI Technologies	1-5 V	Medidor de presión
PI-001	Manómetro	Presión	-	0-60 psig	Manómetro entrada de vapor
PI-002	Manómetro	Presión	-	0-100 psig	P del vapor después de válvula de control
PI-003	Manómetro	Presión	ASHCROFT	0-30 psig	Manómetro del calderín calderín
PI-004	Manómetro	Presión	EAGLE	0-30 psig	Manómetro superior de la torre
PI-005	Manómetro	Presión	-	5-200 psig	Manómetro aire comprimido
TE 001-010	Termocupla tipo J	Temperatura	Omega	0-750 °C	Medidores de T en cada plato (1-10)
TE-012	Termocupla tipo J	Temperatura	Omega	0-750 °C	T. del agua, entrada del condensador
TE-013	Termocupla tipo J	Temperatura	Omega	0-750 °C	T. del agua, salida del condensador
TI-001	Termómetro bimetálico	Temperatura	Cole-Palmer	0-100 °C	Termómetro del calderín

Cuadro XVI.2: Válvulas de la columna de destilación

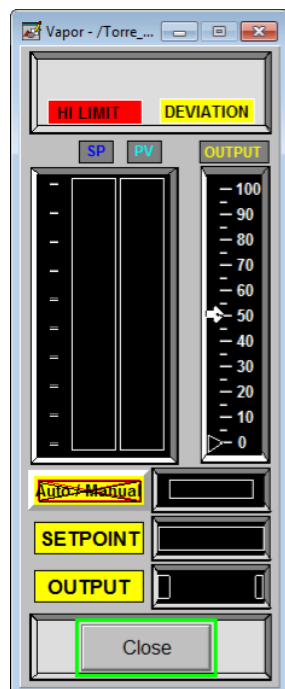
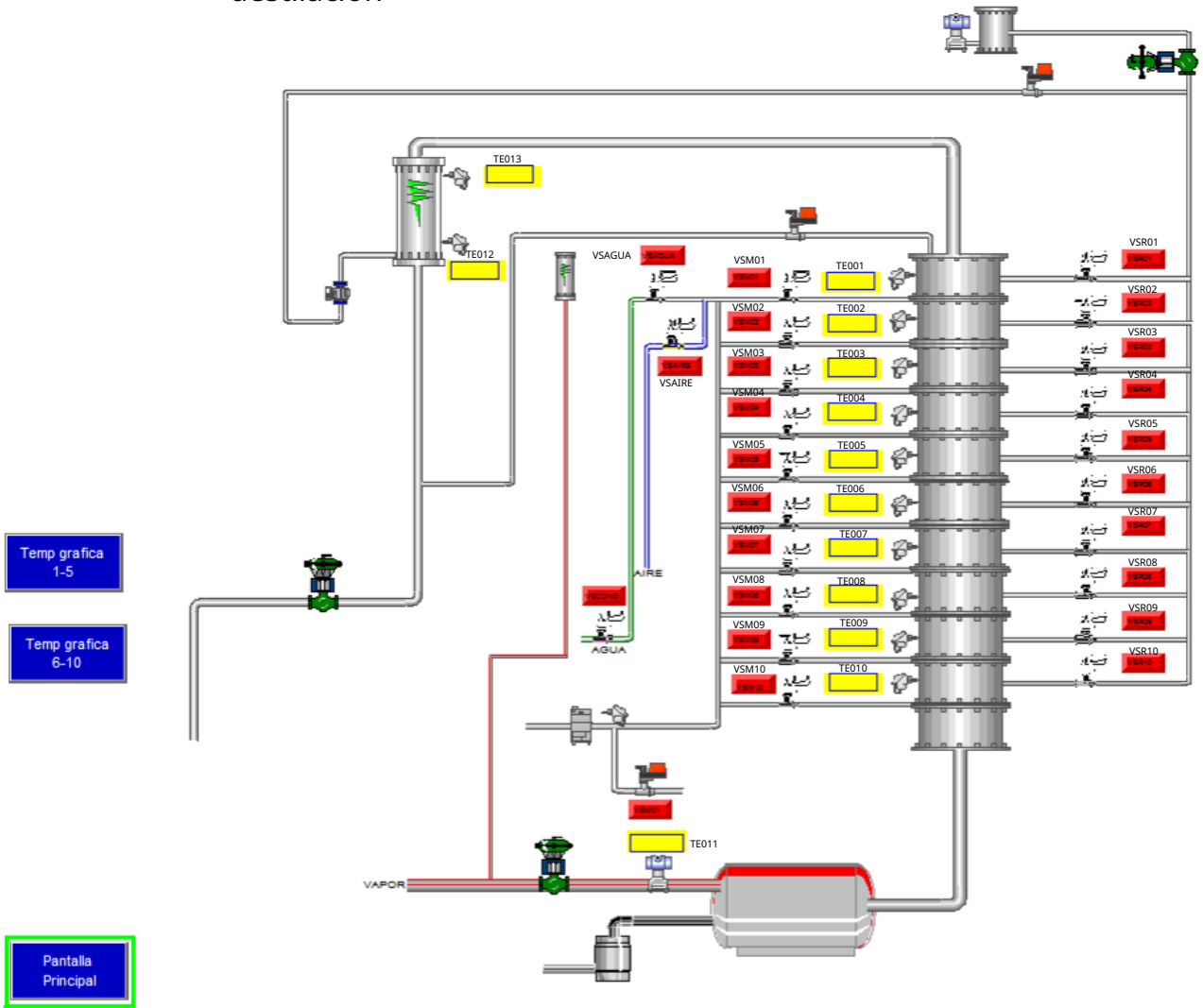
Código(s)	Corriente	Tipo	Auto / Manual	Marca	Id. Color	Tamaño
V G01-G10	Muestras vapor	Bola	M	UA	Negro	1/4"
V M01-M10	Muestras líquido	Bola	M	SI-Valve	Azul	1/4"
V-M11	Líquido purga	Bola	M	SI-Valve	Azul	1/4"
V R01-R10	Alimentación	Bola	M	URREA	Naranja	3/8"
V-001	Vapor	Asiento	M	Red-White TOYO	Blanco/Rojo	3/4"
V-002	Vapor	Asiento	M	Red-White TOYO	Rojos	3/4"
V-003	Condensado de vapor	Bola	M	SI-Valve	Negro	1/2"
V-004	Vapor	Asiento	M	-C-	Negro	1"
V-005	Vapor	Asiento	M	-C-	Negro	1"
V-006	Vapor	Asiento	M	-C-	Negro	1"
V-007	Vapor	Asiento	M	-C-	Negro	3/8"
V-008	Agua desde torre enfriamiento	Asiento	M	Red-White TOYO	Blanco/Rojo	1/2"
V-009	Agua municipal	Asiento	M	Red-White TOYO	Negro	1/2"
V-010	Agua fría	Asiento	M	Red-White TOYO	Blanco/Rojo	1/2"
V-011	Destilado	Asiento	M	HYDRO	Naranja	1/2"
V-012	Destilado	Asiento	M	Keyuan	Azul	3/4"
V-013	Reflujo/alimentación	Asiento	M	URREA	Naranja	1/2"
V-014	Reflujo	Bola	M	SI-Valve	Azul oscuro	3/4"
V-015	Alimentación	Bola	M	Keyuan	Azul	3/4"
V-016	Aire comprimido	Asiento	M	Milwaukee	Rojos	1/2"
V-017	Agua fría	Asiento	M	Milwaukee	Rojos	1/2"
V-018	Líquido purga	Asiento	M	KITZ	Negro	1/4"
V-019	Residuo	Asiento	M	Red-White TOYO	Blanco/Rojo	1"
VS M01-M10	Muestras líquido	Bola	A	Parker	-	1/8"
VS R01-R10	Alimentación	Bola	A	Parker	-	1/8"
VS-001	Vapor	Asiento inclinado	A	ASCO Valves	-	3/4"
VS-002	Agua fría	Bola	A	BACCARA	-	1/2"
VS-003	Reflujo	Bola	A	Parker	-	1/2"
VS-004	Reflujo	Bola	A	Parker	-	3/4"
VS-005	Alimentación	Bola	A	AALBORG	-	3/4"
VS-AGUA	Agua fría	Bola	A	BACCARA	-	1/2"
VS-AIRE	Aire comprimido	Bola	A	BACCARA	-	1/2"



UNLESS OTHERWISE SPECIFIED, DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS		NAME	SIGNATURE	TITLE <b>P&amp;ID columna de destilación</b> Laboratorio de Operaciones Unitarias Universidad del Valle de Guatemala
ANGULAR = ± °	DRAWN	Abigail Xutuc		
SURFACE FINISH 	CHECKED	Ing. Jorge L. Muñoz		
DO NOT SCALE DRAWING	APPROVED	Ing. Allan Cifuentes		
BREAK ALL SHARP EDGES AND REMOVE BURRS				SIZE <b>A</b>
THIRD ANGLE PROJECTION 	MATERIAL			DWG NO. <b>003</b>
	FINISH			REV. <b>2</b>
				SCALE ----
				WEIGHT ---
				SHEET 1 of 2



# Pantalla con los controles de la columna de destilación



Ventana para control del vapor

