



EDUCACIÓN
SECRETARÍA DE EDUCACIÓN PÚBLICA



TECNOLÓGICO
NACIONAL DE MÉXICO®



TESCO
TECNOLÓGICO
DE ESTUDIOS
SUPERIORES
DE COACALCO



TECNOLÓGICO DE ESTUDIOS SUPERIORES DE COACALCO

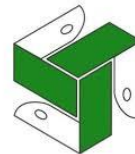
**“DESARROLLO DE UN SIMULADOR PARA EL CÁLCULO DE NUMERO DE
ETAPAS TEÓRICAS DE UNA COLUMNA DE DESTILACIÓN POR EL MÉTODO
DE PONCHON-SAVARIT”**

DONOVAN JAIR GONZALEZ BALTAZAR

PROYECTO DE INVESTIGACIÓN

CARRERA: INGENIERÍA QUÍMICA

COACALCO DE BERRIOZÁBAL, ESTADO DE MÉXICO, MAYO, 2024



TECNOLÓGICO DE ESTUDIOS SUPERIORES DE COACALCO

**“DESARROLLO DE UN SIMULADOR PARA EL CÁLCULO DE NUMERO DE
ETAPAS TEÓRICAS DE UNA COLUMNA DE DESTILACIÓN POR EL MÉTODO
DE PONCHON-SAVARIT”**

PROYECTO DE INVESTIGACIÓN

PARA OBTENER EL TÍTULO DE **INGENIERA QUÍMICA** CON ESPECIALIDAD EN
PETROQUÍMICA SECUNDARIA

PRESENTA: *DONOVAN JAIR GONZALEZ BALTAZAR*

MATRÍCULA: 201620666

NOMBRE DE ASESOR INTERNO:

DR. JULIO GONZALEZ GARCIA

COACALCO DE BERRIOZÁBAL, ESTADO DE MÉXICO, MAYO, 2024



AGRADECIMIENTOS

Quiero agradecer principalmente a mi mamá que siempre me apoyo a pesar de todas nuestras limitaciones, que siempre busco lo mejor para mí y mis hermanos, nunca se conformó con lo poco o mucho que llegásemos a tener. Jamás se rindió para darnos la vida que ella creyó que merecíamos, y sinceramente, nos dio más de lo que debía. Siempre siendo el pilar de mi vida.
TE AMO MAMÁ

También agradezco inmensamente a mis abuelos maternos, han estado para mí y mi familia en todos los momentos difíciles, y a su modo siempre me han dado ánimos para seguir adelante tanto en el ámbito personal profesional y escolar, sin ellos no estaría donde estoy y no sería quien soy. LOS AMO FRANCISCO Y MARCELA.

Quiero agradecer a mis hermanos, porque son otros pilares de mi vida, y siempre han estado, tanto en las buenas como en las malas. Quiero agradecer a mi papa porque sé que siempre dio todo lo que pudo para ver bien a sus hijos, y a pesar de sus dificultades, nos ha procurado a su manera. LOS AMO.

Agradezco a mi amigo Jehoschuah, que después de aproximadamente 13 años de conocerlo, a su modo desea lo mejor para mí y siempre esta cuando lo necesito, sin importar nada, siempre estará ahí, es el hermano que elegí.

Agradezco a mi amiga Carmen Itzel, porque ella nunca me dejo caer y siempre que veía que iba para abajo, ella me alentaba, me regañaba y me motivaba a seguir con mis sueños. Sin sus regaños y su insistencia, no estaría hoy día acabando esta tesis.

Mi demás familia; mi abuela Rosaura, mis tíos y primos, que de alguna u otra manera me han apoyado y dando ánimos cuando no los tenía, siempre deseándome lo mejor y siendo parte de lo que mantiene mi vida en su lugar.

Gracias a todas las personas que alguna vez fueron parte de mi vida y que estuvieron en las buenas y las malas, que vieron cuanto luche por llegar a donde estoy.



ÍNDICE

Contenido

AGRADECIMIENTOS	2
ÍNDICE	4
ÍNDICE DE FIGURAS, TABLAS, GRÁFICOS Y ANEXOS	6
CAPITULO I GENERALIDADES DEL PROYECTO	8
INTRODUCCIÓN.....	9
JUSTIFICACIÓN	10
PROBLEMÁTICA A RESOLVER	11
ANTECEDENTES	12
OBJETIVOS.....	15
GENERAL	15
ESPECIFICOS	15
ALCANCES Y LIMITACIONES.....	16
IMPACTOS ESPERADOS Y VIABILIDAD.....	17
CAPITULO II. MARCO TEÓRICO.....	18
OPERACIONES UNITARIAS	19
IMPORTANCIA DE LA DESTILACIÓN.....	21
NUEVAS TECNOLOGÍAS DENTRO DE LA DESTILACIÓN.....	22
TECNOLOGÍA DE LA PARED DIVISORA:	22
TECNOLOGÍA EMERGENTE DENOMINADA DESTILACIÓN POR MEMBRANA.....	23
TECNOLOGÍA DE SISTEMAS DE DESTILACIÓN AL VACÍO	23
TECNOLOGÍA COOSW	24
GENERALIDADES DE LA DESTILACIÓN	25
REFLUJO	29
Reflujo total.....	29
Reflujo mínimo y máximo	29
Relación de reflujo	29
CONDENSADOR TOTAL O PARCIAL	30
CONDENSADOR TOTAL	30
CONDENSADOR PARCIAL	30
REBOILER	30



MÉTODO DE MCCABE-THILE	31
MÉTODO DE PONCHON-SAVARIT:	31
SIMULACIÓN DE PROCESOS.....	44
CHEMCAD.....	44
SCILAB	45
SIMQUIM.....	46
ASPEN PLUS	46
ASPEN HYSYS	47
COCO	48
CHEMSEP	48
MATLAB.....	49
INTERFAZ CON OTROS LENGUAJES DE PROGRAMACIÓN	50
OCTAVE	50
CAPITULO III. DESARROLLO	52
CAPITULO IV. RESULTADOS	59
Ejemplo 1 Separación de una mezcla benceno-tolueno	59
Ejemplo 2 Separación de una mezcla etanol-agua.....	62
CONCLUSIONES.....	65
COMPETENCIAS DESARROLLADAS	66
FUENTES DE INFORMACIÓN	67
ANEXOS.....	72



ÍNDICE DE FIGURAS Y ANEXOS

Figura 2.1 Destilación fraccionada del petróleo crudo (Lifeder, 2022).	21
Figura 2.2 Separación de Benceno en una columna de destilación de pared divisora (Delp, 2022).	22
Figura 2.3 Esquema simplificado del proceso de destilación por membrana (Lenntech, 2022).	23
Figura 2.4 El punto de ebullición de las sustancias por separar es más bajo en vacío (Busch Vacuum, 2022).	24
Figura 2.5 Especialistas del proyecto COOSW en la plataforma oceánica de canarias (COOSW, 2022).	25
Figura 2.6 Esquema de una destilación simple a nivel laboratorio (De química, 2022).	27
Figura 2.8 Equipo de destilación fraccionada a nivel laboratorio (Lifeder, 2022).	28
Figura 2.9, álgebra para los balances generales.	32
Figura 2.10, identificación de las zonas dentro de la torre de destilación.	32
Figura 2.11, álgebra en la zona de rectificación.	33
Figura 2.12, álgebra de la etapa 1.	33
Figura 2.13, álgebra en la etapa 2.	33
Figura 2.13, álgebra para la zona de agotamiento.	34
Figura 2.14, álgebra en la etapa N-1.	34
Figura 2.15, ejemplo del caso de un vapor sobre-calentado.	35
Figura 2.16, localización de la alimentación.	36
Figura 2.17, Cálculo del reflujo mínimo mediante puntos pinch.	37
Figura 2.18, cálculo de P	37
Figura 2.19, línea de balance de P'.	38
Figura 2.20, obtención de y_2	38
Figura 2.22, obtención de x_3 y y_3	39
Figura 2.23, obtención de x_4 y y_4	40
Figura 2.24, obtención de x_5 y y_5	40
Figura 2.25, obtención de x_6 y y_6	41
Figura 2.26, obtención de x_7 y y_7	41
Figura 2.26, cálculo de Q_C y Q_R	42
Figura 2.27, línea de balance que tiende a infinito.	42
Figura 2.28, se traza P' que tiende a infinito.	43



Figura 2.29, cálculo de etapas mínimas.	43
Figura 3.1, variables de entrada.	52
Figura 3.2, menú de gráficas.	52
Figura 3.3, datos de equilibrio de temperatura.....	52
Figura 3.4 Datos de equilibrio de entalpía.	53
Figura 3.5 Cálculo para convertir fracción masa a fracción molar.	53
Figura 3.6, código para interpolación cúbica.	53
Figura 3.8, código para el equilibrio del vapor.	54
Figura 3.9 Calculo de entalpías	54
Figura 3.10, líneas en el diagrama de entalpía.	54
Figura 3.11, cálculo de reflujo mínimo.....	55
Figura 3.12, cálculo de relación de reflujo operativo.....	55
Figura 3.13 establecimiento de vectores.	55
Figura 3.14, puntos de equilibrio.....	55
Figura 3.15, interpolación cubica	56
Figura 3.16, define el criterio para detener el cálculo de las etapas.	56
Figura 3.17 condicional if para el cálculo de etapas.	56
Figura 3.18 condicional else para el cálculo de etapas.	57
Figura 3.19, parámetros de gráfica.	57
Figura 3.20, switch para separar las diferentes gráficas.....	57
Figura 4.1 Parámetros iniciales (benceno-tolueno).....	59
Figura 4.2 Datos de equilibrio y entalpía (vencen-tolueno).....	59
Figura 4.3 Resumen de resultados (benceno-tolueno).	60
Figura 4.4 Menú para la selección de representación gráfica.	60
Figura 4.5 Resolución de método ponchon-savarit, benceno-tolueno.....	61
Figura 4.6 Parámetros iniciales	62
Figura 4.7 Datos de equilibrio, entalpía y peso molecular de los componentes.	62
Figura 4.8 resumen de resultados (etanol-agua)	63
Figura 4.9 Menú para la selección de representación gráfica.	63
Figura 4.10 Resolución de método ponchon-savarit, etanol-agua.....	64
Anexo 1 Codificación del software “enthalpy destilation”	72



CAPITULO I

GENERALIDADES

DEL PROYECTO

CAPITULO I GENERALIDADES DEL PROYECTO

INTRODUCCIÓN

Las operaciones unitarias son procesos esenciales para cualquier industria, ya que gracias a ellas somos capaces de crear y transformar un sinnúmero de productos y servicios que el ser humano necesita para su vida diaria. Debido a la demanda de estos equipos en la industria química en especial las torres de destilación, el ingeniero debe encontrar la solución óptima con respecto al volumen aceptable de residencia, la altura de la columna y el costo de construcción, y todo lo anterior se puede realizar con programas de simulación de procesos químicos (este es el tema fundamental de este trabajo, la importancia y el impacto que llegan a tener los programas en el ámbito académico para la enseñanza y la reducción de costos y tiempo al momento del diseño de las torres de destilación).

Con el paso de los años, las tecnologías y programas en el área de la destilación han ido avanzando sin embargo estas no son tan accesibles para los estudiantes del TESCO.

Desde el punto de vista didáctico, los programas más utilizados por los estudiantes son: Matlab, chemshep, aspen hysys, coco, aspen plus, simquim, scilab, chemcad y octave que es el que se usó para la creación del programa “Enthalpy destilation”.

Y el objetivo de este trabajo se basa en adaptar, programar un algoritmo y plantear una simulación en octave llamado “enthalpy destilation” para el cálculo de número de etapas teóricas de una columna de destilación por el método de Ponchon-Savarit.

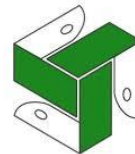
JUSTIFICACIÓN

Los métodos gráficos no llegan a ser tan precisos como nos gustaría, ya que muchas veces depende de la perspectiva y del error humano, estos no son métodos rigurosos, gastan mucho tiempo para realizarlos así como para realizar alguna modificación, ya sea para realizar otro cálculo o por algún error.

El tener un código que ejecute el método Ponchon-Savarit para calcular las etapas teóricas de una columna de destilación, permite tener una mayor exactitud y precisión al realizar el diseño de una columna de destilación binaria. Por lo tanto, este método permite obtener datos más exactos y tener una menor pérdida de recursos para el proyecto.

Este software está enfocado a complementar la enseñanza de los alumnos del tecnológico para el cálculo de platos teóricos en la destilación. De esta forma los alumnos tendrán libre acceso al software sin necesidad de pagar licencia.

El método es muy tardado, y si se requieren hacer más de una mezcla binaria, el tiempo se extiende de una manera considerable. Con ayuda del software “Enthalpy destilation” solo se requiere ingresar los datos de equilibrio y entalpia, para correr el programa, lo cual se realiza en máximo 10 min.



PROBLEMÁTICA A RESOLVER

La metodología de Ponchon-Savarit es para un método gráfico el cual requiere una gran precisión, ya que cualquier error por más mínimo, nos puede dar resultados erróneos. Existe la necesidad de un software para reducir el error humano, ya que la elaboración de la gráfica es sumamente demandante.

De igual manera requiere de muchos cálculos, y cuando se llega a tener un error, repetir todo consume mucho tiempo y recursos humanos. Un software especializado es costoso y difícil de obtener licencias y/o desarrollar.

ANTECEDENTES

(Carvalho, 2022) Estudió y simuló el proceso de destilación con un método de cálculo de coeficientes de actividad, derivado de la química cuántica. Se realizaron comparaciones de simulaciones de aspen y MATLAB con la finalidad de validar los resultados de COSMO-SAC (el modelo de COSMO-SAC, utiliza una base de química cuántica para la obtención de los *sigma profiles*).

(Santos, 2022) estudió y simuló el proceso de destilación con un método de cálculo de coeficientes de actividad derivado de la química cuántica. Además, se realizaron comparaciones de simulaciones de aspen y matlab con la finalidad de validar los resultados de COSMO-SAC (el modelo de COSMO-SAC, utiliza una base de química cuántica para la obtención de los sigma profiles).

(castellano, 2022) trabajó en implementar una interface de usuario con un método aplicado y comparar los resultados obtenidos con los programas comerciales utilizados para la simulación de sistemas de destilación (se emplea el método de mcabe-thiele y los programas comerciales como lo son Matlab, chemcad y aspen plus).

(Luis Caiza, 2022) presentó un modelo de simulación de una columna de destilación binaria ideal (constituida por diez platos y un rehedidor y un tanque de reflujo), se realizó un análisis mediante el balance de materia y energía; y se implementaron dos métodos numéricos: Euler y Runge Kutta. Las simulaciones resultantes del sistema para cada método numérico utilizado se compararon en base al tiempo de muestreo. Los resultados de las simulaciones mostraron la evolución temporal de las concentraciones de los componentes que existen.

(Abanto Valderrama, 2022) realizó el modelado y simulación de una columna de destilación para mezclas multicomponente de hidrocarburos. El método de simulación rigurosa Punto de Burbuja propuesto está basado en un análisis de partición incorporando la clásica matriz tridiagonal de Wang-Henke. Para este diseño se predijo el equilibrio líquido-vapor y las entalpías de la mezcla para sus respectivas fases, a partir de sus propiedades termofísicas de los componentes. Se elaboraron reportes de las temperaturas, composiciones y flujos de la columna, así como gráficas de los perfiles de las mismas.

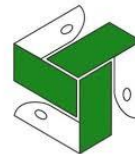
(Yeison Agudelo, 2022) desarrolló el modelado y simulación de una columna de destilación por lotes para la recuperación de epóxido de limoneno de una mezcla multicomponente, usando el software especializado Aspen Batch Modeler. Para la validación de los modelos se desarrolló el proceso experimental en un equipo de roto-evaporación, donde se varió la composición inicial de la mezcla, temperatura y presión de operación.

(Hernández, 2022) diseñó, construyó y puso en marcha una columna empacada para la destilación continua del sistema etanol/agua. La torre se equipó con estrategias de control que garantizaran los parámetros definidos por el diseño, y dentro de los lazos presentes se incluyeron el control de temperatura y presión de la torre; control de flujo y temperatura de la alimentación y fluidos refrigerantes, al igual que controles de nivel de líquido en el rehervidor y tanque de condensados.

Además, se desarrolló un simulador como herramienta académica y estos controles están conectados a una interface que permite que la columna sea operada desde un computador que reportara todos los datos obtenidos por la instrumentación. Las condiciones de operación de la columna podrían ser manipuladas directamente desde el computador por medio de las variables asociadas a los controladores.

(Arnau, 2022) obtuvo un modelo matemático de una unidad de purificación de propileno y posteriormente utilizó este modelo para simular dicha unidad. La obtención del modelo matemático de este proceso industrial fue muy útil tanto para el análisis de los sistemas de control como para el estudio e implementación de modificaciones en el diseño de la planta. En ambos casos el simulador constituyó una herramienta interesante, que de una forma rápida y económicamente emuló los fenómenos básicos del proceso.

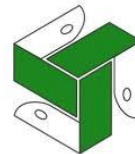
(Labarta, 2022) desarrolló un método y una serie de programas de cálculo destinados al diseño por ordenador de columnas de rectificación y extracción multicomponente. En la primera sección de la memoria se centró en el estudio de las columnas de rectificación multicomponente, proponiéndose métodos de diseño, tanto rigurosos como aproximados, que eliminó algunos de los cálculos iterativos normalmente necesarios en la resolución de este



tipo de problemas, reduciéndose así el tiempo de cálculo requerido; y la segunda sección del presente trabajo se centró en el estudio de columnas de extracción multicomponente.

Algunos de los métodos desarrollados para el cálculo de la rectificación se aplican al caso de extracción líquido-líquido de mezclas cuaternarias, utilizando el mismo esquema de cálculo etapa a etapa, basado en la extensión del método de Ponchon y Savarit para mezclas multicomponentes.

(Rueda Ferreiro, 2022) desarrolló el modelado y simulación del comportamiento dinámico de una columna de destilación, tanto la respuesta en estado estacionario como su comportamiento ante cambios en variables de entrada y perturbaciones, mediante el tratamiento de modelos físico-matemáticos. Como lenguaje de simulación se empleó EcosimPro y se ha tomado como objeto de trabajo una columna de destilación de etanol de la industria azucarera.



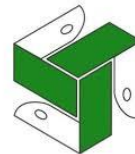
OBJETIVOS

GENERAL

Adaptar y programar un algoritmo para el cálculo de número de etapas teóricas de una columna de destilación por el método de Ponchon-Savarit por medio de una simulación en octave.

ESPECIFICOS

- Desarrollo y codificación de un algoritmo que se pueda ejecutar tanto en “Octave” como en “Matlab” que desarrolle las gráficas necesarias para el método de Ponchon-Savarit.
- Definir paso a paso la metodología para la ejecución correcta del código en cuestión.
- Resolver ejemplos de cálculo de etapas teóricas mediante datos de equilibrio y entalpía en mezclas binarias.



ALCANCES Y LIMITACIONES

El alcance de este proyecto es un software desarrollado para la comunidad del TESCO, el cual funcione de forma correcta y pueda calcular el número de etapas teóricas por el método Ponchon-Sabarit para mezcla binarias, pudiendo validar con ejemplos.

Como limitación es que es para mezclas binarias, no multicomponentes. No cuenta con interfaz gráfica esto hace ligeramente complicado su uso, no existen manuales de operación por lo cual se debe recibir capacitación previa para su uso.



IMPACTOS ESPERADOS Y VIABILIDAD

Se espera que sea un código de libre acceso para la comunidad del TESCO, y que logre facilitar las operaciones para el cálculo de platos teóricos, mediante el método Ponchon-Savarit.

El método mencionado es muy complejo de repetir si se necesita hacer una corrección, es por ello que se ha escrito este código para poder hacer cambios en cuestión de minutos.

Es viable, ya que requiere muy pocos recursos y de fácil alcance.



EDUCACIÓN
SECRETARÍA DE EDUCACIÓN PÚBLICA



TECNOLÓGICO
NACIONAL DE MÉXICO®



TESCO
TECNOLÓGICO
DE ESTUDIOS
SUPERIORES
DE COACALCO

CAPITULO II

MARCO TEÓRICO

CAPITULO II. MARCO TEÓRICO

OPERACIONES UNITARIAS

Las diferentes áreas de la industria química fueron consideradas con principios y procesos industriales; *Arthur Dehon Little* en 1916 propuso el concepto de operaciones unitarias con la finalidad de explicar los procesos químicos industriales (Wikipedia, 2022a).

La ingeniería química se basa en operaciones unitarias, las cuales son cada uno de los cambios físicos que se producen en los procesos de la industria química. Y los principales objetivos de las operaciones unitarias son:

1. Estudiar las distintas operaciones básicas dentro de un proyecto productivo de la industria química, petroquímica o de aquellas relacionadas, aplicando los conocimientos adquiridos sobre los fenómenos de transporte y los balances de materia y energía.
2. Realizar cálculos para verificación, selección y diseño responsable de equipos que impliquen operaciones de transferencia de cantidad de movimiento y de calor.
3. Crear "software" como herramienta de diseño.
4. Desarrollar el ingenio y la creatividad para impactar positivamente sobre la calidad de vida de las personas y de la comunidad toda promoviendo la seguridad, la calidad y el respeto por el ambiente a través de la creación y uso de la tecnología (Aprea, 2022).

Es relevante mencionar que, en los procesos químicos cada operación unitaria tiene como objetivo modificar las condiciones de una determinada cantidad de materia en una forma más útil para fines industriales.

Estos cambios se pueden llevar a cabo mediante la modificación de:

1. Masa/composición.
2. Nivel/calidad de energía.

3. Condición de movimiento.

Mencionando que a cada cambio le corresponde una ley de conservación:

1. Conservación de la materia.
2. Conservación de la energía.
3. Conservación de la cantidad de movimiento.

Es importante mencionar que el conjunto de operaciones unitarias se clasifica según la propiedad que se transfiera en la operación, las cuales pueden ser:

- Operaciones unitarias de transporte de cantidad de movimiento y un ejemplo sería el sistema sedimentador.
- Operaciones unitarias de transferencia de calor; los ejemplos serían: sistema de evaporador e intercambiadores de calor.
- Operaciones unitarias de transferencia de materia; los ejemplos serían: sistema compuesto por un tanque extractor y un decantador, **destilación**, absorción y desorción, extracción, adsorción, intercambio iónico.
- Operaciones unitarias de transferencia simultánea de materia y energía, un ejemplo sería la humidificación (Fernández, 2022).

En conclusión, las operaciones unitarias son la base de los diseños de plantas químicas, fábricas y equipos utilizados; y se diseñan en función de los flujos de entrada para cada componente elemental (que puede ser infinitesimal) en forma de ecuaciones, y resolviendo las ecuaciones para los parámetros de diseño, luego seleccionando una solución óptima entre las varias posibilidades y luego diseñar el equipo físico.

El ingeniero debe encontrar la solución óptima con respecto al volumen aceptable de retención, la altura de la columna y el costo de construcción, todo lo anterior se puede realizar con programas de simulación de procesos químicos (Wikipedia, 2022a).

IMPORTANCIA DE LA DESTILACIÓN

En la industria alimentaria, la destilación se emplea como una operación de transferencia de masa; y sus aplicaciones están en procesos como:

- Obtención de alcoholes (whisky, vodka, ron, brandy o cognac, tequila, etc)
- Aceites esenciales
- Industria Cervera
- Procesos de laboratorio
- Producción de fenol o formaldehído
- Desalinización del agua de mar
- En plantas criogénicas de separación de aire para descomponer el aire de la atmósfera en sus constituyentes principales (Minaya Pinto, 2022).
- Refinado de petróleo, a nivel industrial la destilación fraccionada es relevante por los subproductos petroquímicos en la figura 2.1, se puede apreciar un esquema de dicha destilación:



Figura 2.1 Destilación fraccionada del petróleo crudo (Lifeder, 2022).

NUEVAS TECNOLOGÍAS DENTRO DE LA DESTILACIÓN

La primera tecnología conocida fueron los alambiques, estos se utilizaban para intentar conseguir transformar elementos químicos en otros más valiosos.

En el siglo XIX fue la primera aparición de las columnas de rectificación de funcionamiento continuo.

En los inicios del siglo XX las tecnologías continuán mejorando dando lugar a sistemas como el cracking, utilizado por primera vez en 1936.

A mediados de siglo comenzó el estudio de la separación por destilación de mezclas multicomponentes, así como el perfeccionamiento de la separación de mezclas azeótropas, dando como resultado la obtención de productos prácticamente puros mediante destilación, rectificación y fraccionamiento en la década de los 80 (Condorchem envitech, 2022).

Dentro de las tecnologías más relevantes son:

TECNOLOGÍA DE LA PARED DIVISORA:

Son excelentes modificaciones para eliminar los cuellos de botella de las columnas agua abajo, como los divisores de nafta. Dependiendo del área de aplicación se clasifican en pared divisora superior, media o inferior. Una columna de pared divisora intermedia es un reemplazo ideal para dos columnas en serie (reemplaza la necesidad de separadores laterales en columnas de destilación), y podemos observar un ejemplo de esta en la figura 2.2. Los usos de esta tecnología son plantas de gas, divisores de nafta y divisores de reformado (Flavio, 2022).

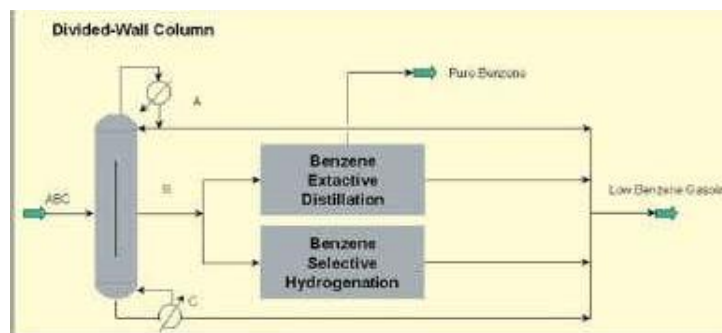


Figura 2.2 Separación de Benceno en una columna de destilación de pared divisora (Delp, 2022).

TECNOLOGÍA EMERGENTE DENOMINADA DESTILACIÓN POR MEMBRANA

Tiezheng Tong, profesor de ingeniería en la Universidad del Estado de Colorado (CSU), estudia dicha tecnología. Es una membrana repelente al agua y hace uso del gradiente de presiones de vapor a ambos lados de la membrana debido al gradiente de temperatura entre el líquido más caliente con impurezas y el agua purificada, más fría. Durante el proceso, el vapor de agua pasa a través de la membrana y se separa del agua con impurezas como se muestra en la figura 2.3. Según Tong, la destilación por membrana funciona mejor que otras tecnologías como la osmosis inversa, que no puede tratar agua con gran concentración de sales como las salmueras de plantas desaladoras o agua producida en la fracturación hidráulica (Tong, 2022).

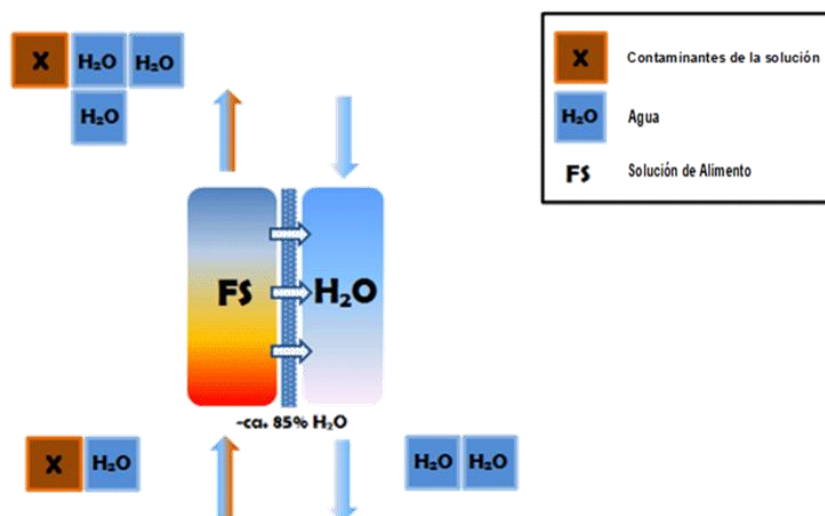


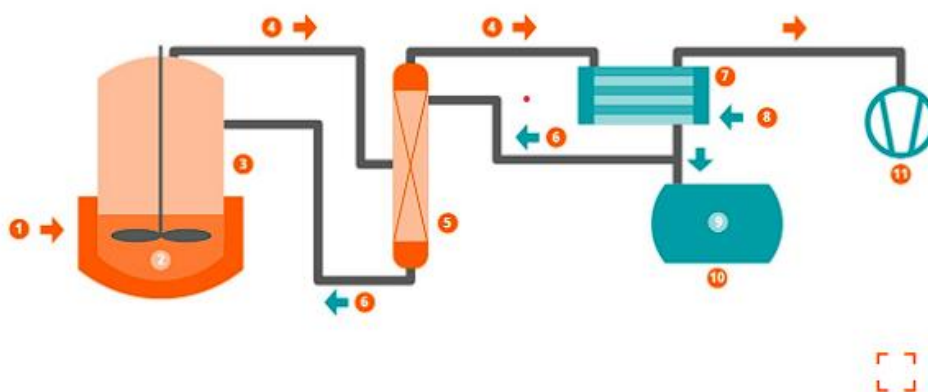
Figura 2.3 Esquema simplificado del proceso de destilación por membrana (Lenntech, 2022).

TECNOLOGÍA DE SISTEMAS DE DESTILACIÓN AL VACÍO

Los sistemas de destilación al vacío VACUDEST tratan las aguas residuales industriales en un proceso por etapas seguro y eficaz. Esta tecnología consiste en la separación de materia en función de las diferencias en el punto de ebullición. El agua residual industrial se evapora. Todas las sustancias que tienen un punto de ebullición superior al del agua permanecen en los residuos de la evaporación. Entre ellos están los metales pesados, las sales y también los aceites, las grasas o los agentes tensoactivos.

Dado que la parte de agua se evapora, el volumen de los residuos de evaporación se reduce de un 0,5 hasta un 5 por ciento del volumen del agua residual original. El vapor de agua que asciende, también denominado vapor desprendido, está casi libre de contaminantes. Después de la condensación, puede devolverse al proceso de producción como agua de proceso. De este modo su producción está completamente libre de aguas residuales. Algunas sustancias no pueden separarse del todo con este sistema.

Como consecuencia el destilado procedente de la evaporación convencional suele ser turbio y de calidad deficiente, con lo cual debe de volver a tratarse, y en la figura 2.4 se puede apreciar un esquema de este sistema (VACUDEST, 2022).



1: Calor 2: Alimentación / residuo 3: Depósito de reacción / calefactor 4: Vapores 5: Columna de fraccionamiento 6: Reflujo 7: Condensador 8: Refrigeración 9: Destilado 10: Recipiente 11: Unidad de vacío

Figura 2.4 El punto de ebullición de las sustancias por separar es más bajo en vacío (Busch Vacuum, 2022).

TECNOLOGÍA COOSW

Esta tecnología COOSW es un proyecto, que, a base de diferentes innovaciones científicas, permiten en una planta del tamaño de un contenedor marítimo estándar y transportable, desalar agua de mar por destilación al vacío multietapa, lo que genera un agua muy pura que tiene importantes aplicaciones.

Es un trabajo de cooperación entre México (UNAM), la República Dominicana (PUCMM), Alemania (FRAUNHOFER) y España (Universidad Autónoma de Barcelona, Plocán y

Cimne), coordinado por el Centro Internacional de Métodos Numéricos en Ingeniería, en la figura 2.5 podemos observar a estos especialistas. Una de las principales características de este sistema de desalinización de agua de mar por destilación al vacío es la tecnología usada para optimizar el proceso, que requiere de una cantidad de energía muy pequeña (inferior a 1.7 kWh/m³) y que puede usar una fuente de calor residual industrial o renovable, como puede ser la geotermia, la energía de las olas, el calor de máquinas o el residual de sistemas de calefacción, que normalmente se dispersa en la atmósfera (COOSW, 2022).

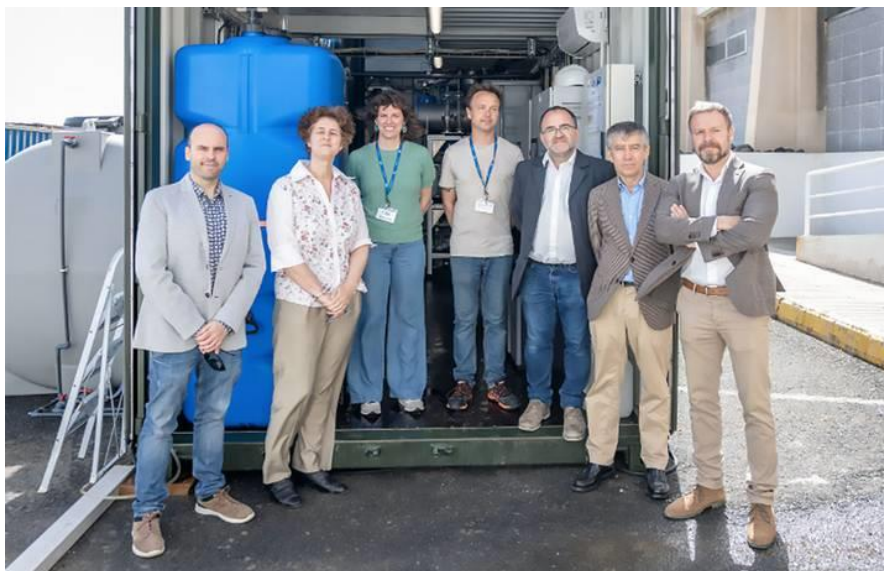


Figura 2.5 Especialistas del proyecto COOSW en la plataforma oceánica de canarias (COOSW, 2022).

GENERALIDADES DE LA DESTILACIÓN

Dentro de la industria, la destilación es una operación de la ingeniería química cuya principal finalidad es separar mezclas líquidas de sustancias y para ello se modifica la fase de una fracción de la mezcla suministrando energía (estas sustancias deben de tener distintos puntos de ebullición; mientras mayor sea la diferencia, más eficaz y mayor grado de pureza tendrá la separación de sus componentes) (Badajoz, 2022).

El fundamento teórico de la destilación se basa en la ley de Dalton y en la ley de Raoult; a partir de estas leyes se puede deducir que, si se tiene una mezcla líquida en equilibrio con su vapor, la fracción molar de cada componente de la mezcla en estado gaseoso para un líquido de comportamiento ideal está relacionado con las presiones de vapor de los componentes

puros y con las fracciones molares de los mismos en estado líquido mediante la siguiente expresión:

$$Y_i = \frac{P_i^0 X_i}{\sum P_i^0 X_i} \quad \text{Ecuación 1}$$

Y_i = *Fracción molar de cada componente en la fase gaseosa*

X_i = *Fracción molar de cada componente en la fase líquida*

P_i^0 = *Presión de vapor de cada componente puro*

Para una destilación a nivel laboratorio, es necesario contar con un calentamiento continuo, pero suave; además que la localización del bulbo del termómetro debe quedar frente al tubo de desprendimiento de los vapores (de tal forma que el bulbo esté continuamente bañado por el flujo del vapor que condensa, registrando la temperatura de los vapores que destilan); para poder obtener una ebullición (continua y regular).

Se debe agregar al matraz de destilación uno o dos pedacitos de porcelana o piedras de destilación y el paso más importante para la destilación es que el matraz nunca se debe de llenar a un volumen mayor de la mitad de la capacidad con el líquido a destilar y no es correcto dejar bajar su volumen a menos de 1/3 de su capacidad. Para finalizar, el agua que circulará por el refrigerante se hará circular en sentido ascendente desde la tubuladura inferior a la superior y no en sentido contrario, como podemos observar en la figura 2.6 (Universidad tecnológica de pereira, 2022).

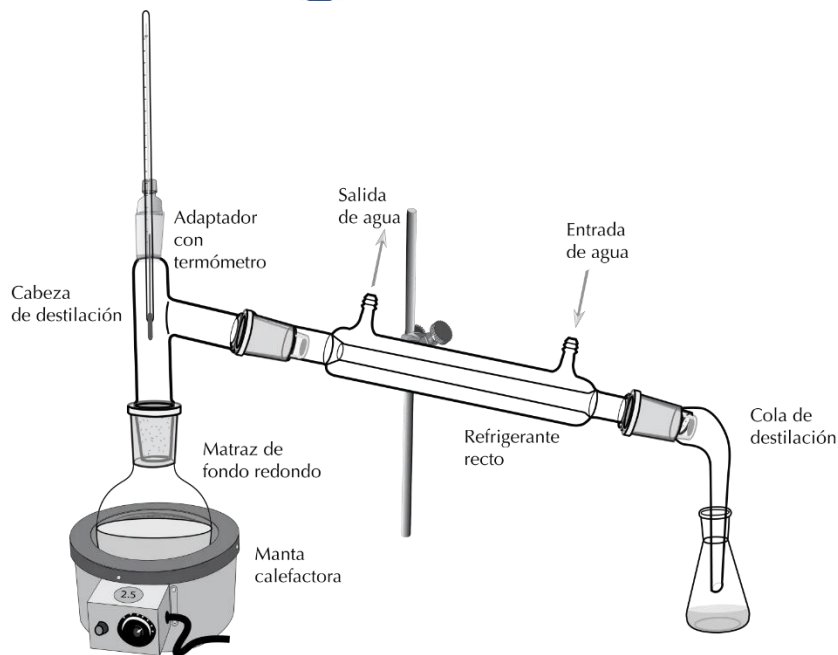


Figura 2.6 Esquema de una destilación simple a nivel laboratorio (De química, 2022).

La técnica de destilación consiste en calentar la mezcla hasta que ésta entra en ebullición (esto debido a las diferentes propiedades físico-químicas de las sustancias). En este momento los vapores en equilibrio con el líquido se enriquecen en el componente de la mezcla más volátil (el de menor punto de ebullición). A continuación, los vapores se dirigen hacia un condensador que los enfría y los pasa a estado líquido. El líquido destilado tendrá la misma composición que los vapores y; por lo tanto, con esta sencilla operación se habrá conseguido enriquecer el líquido destilado en el componente más volátil.

Por consiguiente, la mezcla que quede en el matraz de destilación se habrá enriquecido en el componente menos volátil. Las propiedades fisicoquímicas toman un papel importante en el momento de seleccionar el tipo de destilación que se deseará utilizar; esto debido a que si se parte de una mezcla de dos sustancias en la que sólo una de ellas es volátil, se pueden separar ambas mediante una destilación (el componente más volátil se recogerá por condensación del vapor y el compuesto no volátil quedará en el matraz de destilación); pero si ambos componentes de una mezcla son volátiles una destilación simple no logrará su completa separación, esto debido a que la mezcla comenzará a hervir a una temperatura intermedia entre los puntos de ebullición de los dos componentes, produciendo un vapor que es más rico en el componente más volátil (de menor punto de ebullición).

Si condensamos este vapor obtendremos un líquido enriquecido notablemente en este componente, mientras que el líquido que queda en el matraz estará enriquecido en el componente menos volátil (mayor punto de ebullición). Por tanto, en una destilación simple no se consigue separar completamente las dos sustancias volátiles. Para conseguir esta separación habría que someter a nuevas destilaciones tanto el destilado como el residuo obtenido.

Esto haría el destilado cada vez más rico en el componente más volátil separando éste del menos volátil. Las llamadas columnas de destilación efectúan este proceso de modo continuo. En una columna de destilación el vapor se condensa y se vuelve a destilar muchas veces antes de abandonar la columna. Normalmente se recogen pequeñas fracciones de producto destilado, llamándose al proceso destilación fraccionada (Quimfis, 2022).

Para la destilación fraccionada, la eficacia depende del número de platos teóricos de la columna, lo que está en función del tipo y la longitud de la misma; y habitualmente se utiliza para separar eficientemente líquidos cuyos puntos de ebullición difieran en menos de 100°C , en la figura 2.8 podemos ver un esquema simple de destilación fraccionada a nivel laboratorio. Cuanto menor sea la diferencia entre los puntos de ebullición de los componentes puros, más platos teóricos debe contener la columna de fraccionamiento para conseguir una buena separación (Lifeder, 2022).

Destilación fraccionada

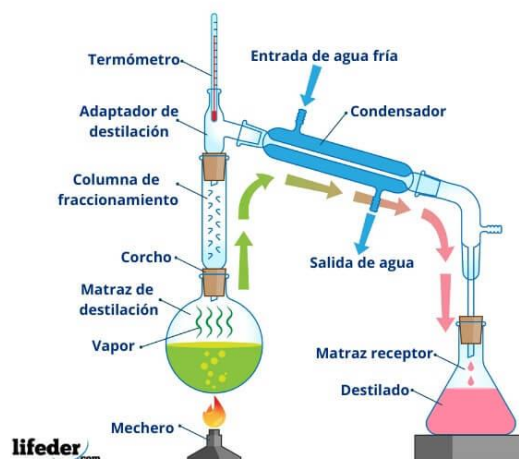


Figura 2.8 Equipo de destilación fraccionada a nivel laboratorio (Lifeder, 2022).

REFLUJO

Reflujo total

Cuando todos los vapores desprendidos en la parte superior de la columna son condensados y devueltos a la misma como reflujo, de modo que no se extrae producto destilado, se dice que la columna opera bajo reflujo total. Pero cuando en una columna de rectificación se aumenta la relación de reflujo, la pendiente de la recta operativa de enriquecimiento va aumentando, hasta que para valores $L/D/D=\infty$ muy grandes (tendiendo a infinito), la pendiente de ésta y la de todas las demás rectas operativas se hacen la unidad. En ese caso, la construcción del diagrama para el cálculo del número de pisos se realizará entre la diagonal y la curva de equilibrio, dando lugar al mínimo número de pisos necesarios para llevar a cabo una separación dada.

Reflujo mínimo y máximo

La presencia de una corriente de reflujo, bien sea una fracción del destilado u otra corriente líquida con una composición elevada en el componente más volátil, es un requisito imprescindible para el enriquecimiento del vapor y, por tanto, para el proceso de rectificación.

En general, la razón de reflujo interna ($L_{k,j} / V_{k,j+1}$) varía al pasar de un piso a otro y no suele utilizarse con mucha frecuencia. Por tanto, habitualmente, al hablar de "razón de reflujo" se está haciendo referencia a la razón de reflujo externa.

La relación de reflujo externo se obtiene a partir del reflujo interno por medio de un balance de entalpía aplicado a la sección de rectificación en la forma:

Donde los subíndices V y L se refieren al vapor que sale de la etapa superior y al líquido de reflujo externo, respectivamente. Para condiciones de flujo molar constante, y si el reflujo se obtiene como líquido saturado, el reflujo interno y el externo coinciden (Universitat d'alicante, 2022).

Relación de reflujo

Se llama así a la relación entre el caudal del líquido que se devuelve a la columna como reflujo y el que se extrae como destilado. Se expresa por la razón L/V (razón de reflujo interna) o como L/D (razón de reflujo externa). La columna rectifica gracias al reflujo que

permite el enriquecimiento del vapor que asciende. Es lógico que al aumentar la relación de reflujo sea mayor el contacto y más fácil la separación.

CONDENSADOR TOTAL O PARCIAL

CONDENSADOR TOTAL

Un condensador se describe como “total” cuando todo el vapor alimentado es completamente transformado en líquido. De la misma manera, se denomina un rehervidor “total” si todo el líquido alimentado es convertido en vapor.

La diferencia entre un condensador total y un rehervidor, es que el condensador es un dispositivo práctico, mientras que un rehervidor total no lo es. La vaporización completa, generalmente, produce problemas de ensuciamiento en los tubos del rehervidor, debido a la deposición de impurezas de componentes de altas temperaturas de ebullición.

CONDENSADOR PARCIAL

Si el condensador o rehervidor solo condensa o vaporiza una parte de la corriente alimentada, se denomina un Condensador Parcial o Rehervidor Parcial

Estos se utilizan como partes complementarias en una columna de destilación. En vista de lo descrito para un rehervidor total se hace necesario aclarar que en un rehervidor parcial parte del alimento se remueve como producto en vez de recircularlo totalmente a la columna. Los condensadores parciales o rehervidores parciales se consideran, siempre como etapas de equilibrio líquido-vapor adicionales dentro de la separación (Solo, 2022).

REBOILER

Un reboiler o rehervidor es un intercambiador de calor que se emplea para calentar el líquido de interés. Normalmente se emplea vapor de agua como flujo que cede calor al fluido a calentar. Este se hace pasar por los tubos y la temperatura de salida de la corriente de líquido al que se ha transferido calor se suele controlar con una sonda. El caudal de vapor se regulará en función de que la temperatura sea inferior o superior a la deseada. En las torres de destilación, los reboilers se sitúan en los fondos para calentar la mezcla líquida que va a ser destilada (Mavainsa, 2022).

MÉTODO DE MCCABE-THIELE

El método de McCabe-Thiele es un método simplificado de diseño con el que se obtienen resultados aceptables en muchas ocasiones, especialmente cuando se trata de mezclas binarias en las que los calores latentes molares de vaporización de los dos componentes que las forman son prácticamente iguales. Éste método, al igual que el método analítico de Sorel-Lewis, se basa en las siguientes hipótesis:

- La presión es constante a lo largo de toda la columna.
- La columna es perfectamente adiabática.
- Los calores latentes molares de los dos componentes de la mezcla son iguales, lo que equivale a suponer que el calor latente molar de vaporización de la mezcla es independiente de la composición de la misma.
- Las variaciones de la entalpía de las dos fases a lo largo de la columna son despreciables frente a los elevados valores de las entalpías del vapor.
- El calor de mezcla también es despreciable frente a los elevados valores de entalpías del vapor (Universidad de Alicante, 2022).

MÉTODO DE PONCHON-SAVARIT:

(Misael, 2022) a continuación se desarrolla el método mediante el video del profesor Misael, tomando imágenes del mismo que se puede encontrar en youtube. Primero requerimos información de materia y energía, ya sea que el mismo problema nos lo de, o realizando un balance de materia y energía para obtener las entradas y salidas. De una manera más detallada a partir del esquema de la torre de destilación, se desarrolla el balance de materia y energía global. En el balance de materia no hay mayor problema, sin embargo en el de energía tenemos a Q_R y Q_C los cuales son el calentamiento y enfriamiento respectivamente, por lo cual Q_R es entrada y Q_C que es salida. Ya acomodada nuestra ecuación, se despeja la entrada F y se factorizan las entalpías, definiendo un valor para P' , como se muestra en la figura 2.9

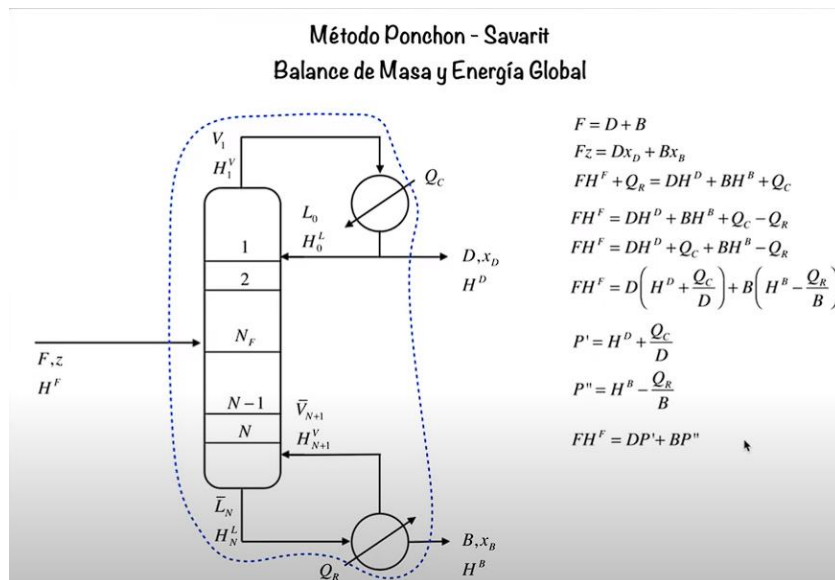


Figura 2.9, algebra para los balances generales.

En una torre de destilación tenemos tres zonas; alimentación, rectificación y agotamiento (figura 2.10)

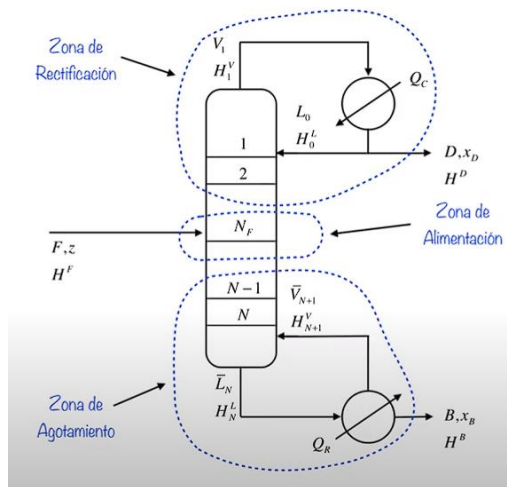


Figura 2.10, identificación de las zonas dentro de la torre de destilación.

En la zona de rectificación realizaremos un balance alrededor del condensador; balance global, por componente y de energía. Se desarrolla el balance y se vuelve a factorizar, para obtener de nuevo el término P' y P'' . Obtenemos la relación de reflujo externo, desarrollando la ecuación podemos obtener el reflujo externo en función de P' y entalpías de vapor y líquido alrededor del condensador (figura 2.11).

Zona de Rectificación

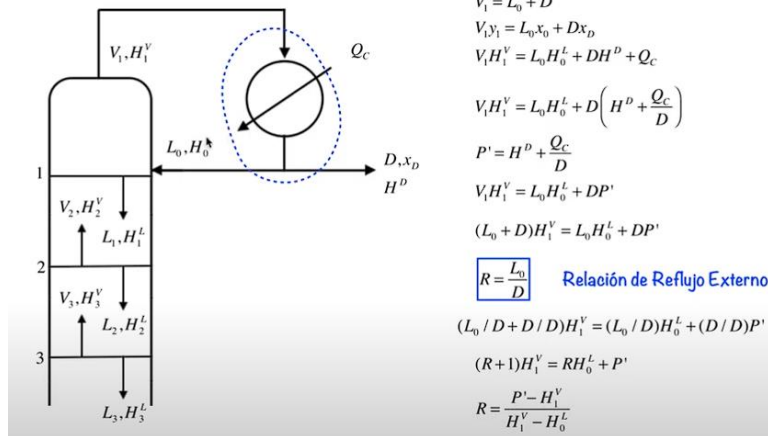


Figura 2.11, algebra en la zona de rectificación.

Se hace un nuevo balance con la etapa 1 (figura 2.12) y 2 (figura 2.13), se hace exactamente lo mismo que en los balances anteriores.

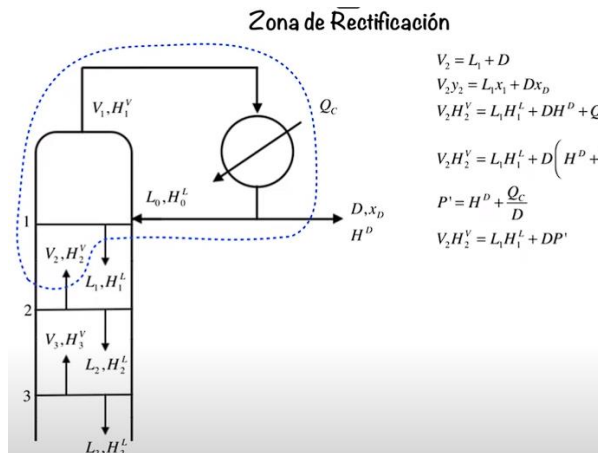


Figura 2.12, algebra de la etapa 1.

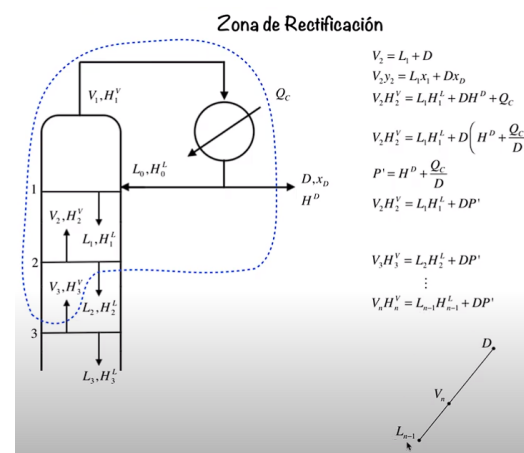


Figura 2.13, algebra en la etapa 2.

Ahora pasamos a la zona de agotamiento y se realiza un balance global, por componente y de energía alrededor del bullidor, con la relación de ebullición, podemos desarrollar la fórmula, como se muestra en la figura 2.13.

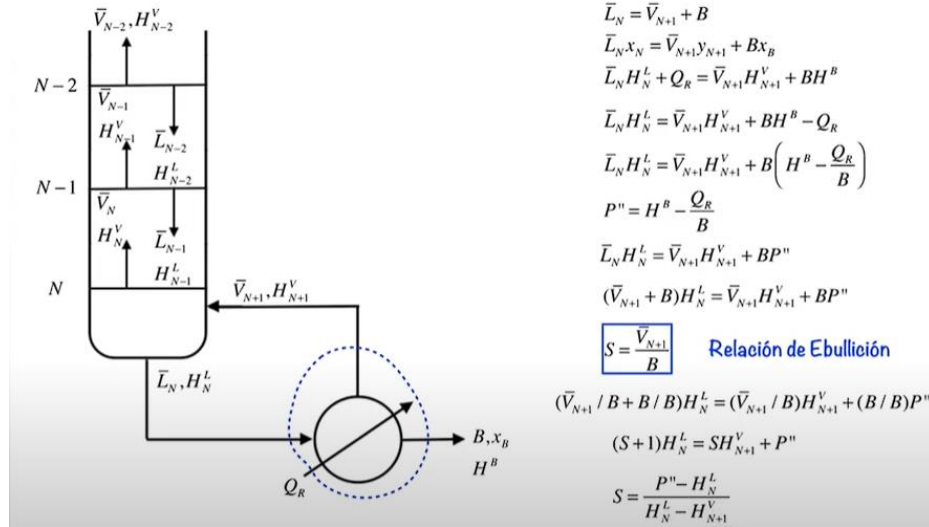


Figura 2.13, algebra para la zona de agotamiento.

Se desarrolla los balances de la siguiente etapa (N), se desarrolla para poder añadir el concepto de P'' , se hace lo mismo con la siguiente etapa (N-1), como se muestra en la figura 2.14

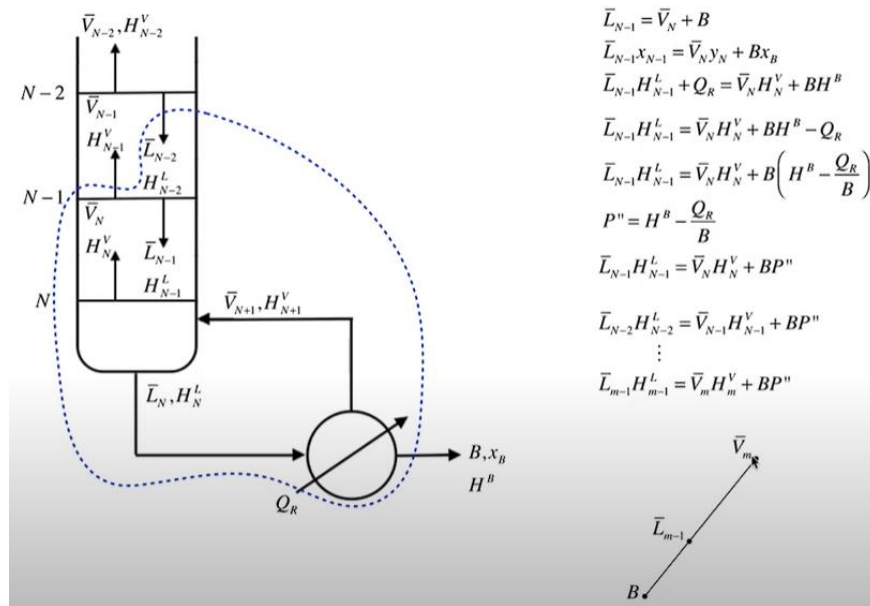


Figura 2.14, algebra en la etapa N-1.

Ahora en la alimentación, donde la calidad de la alimentación está dada por la siguiente

ecuación: $q = \frac{H_F^V - H^F}{H_F^V - H_F^L}$ y se despeja H_F obteniendo la siguiente ecuación:

$H^F = H_F^V - q(H_F^V - H_F^L)$, el valor de q va a variar de la siguiente manera: $q=1$ cuando es un líquido saturado, $q=0$ cuando es un vapor sobresaturado, cuando $0 < q < 1$ es una mezcla líquido-vapor saturado, cuando $q > 1$ es un líquido sub-enfriado y por último cuando $q < 0$ es un vapor sobrecalentado, y podemos ver esto en la figura 2.15

Zona de Alimentación

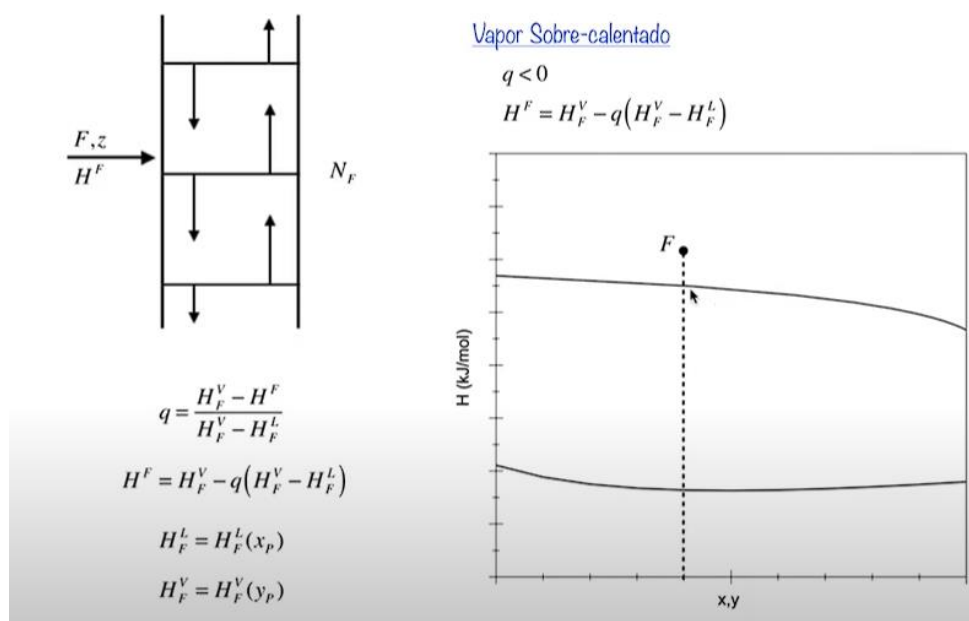


Figura 2.15, ejemplo del caso de un vapor sobre-calentado.

A partir de este punto todo depende de los datos que el problema nos dé, se deberá obtener los balances de materia y energía, y con los mismos datos de presión podemos buscar de muchas fuentes los datos de equilibrio (en caso de no encontrar los datos, se deberán calcular mediante diagramas de equilibrio), con los cuales se construirán gráficos de temperatura contra x - y , x contra y , entalpía contra x - y .

Lo primero es localizar la alimentación con el concepto del punto pinch (utilizado también en el método de McCabe thiele)

Ya teniendo el punto pinch localizamos las coordenadas x_P y y_P , con las cuales localizaremos en el diagrama de entalpia contra x-y los valores de las entalpías H_F^L y H_F^V

Con estos valores y la siguiente formula $H^F = H_F^V - q(H_F^V - H_F^L)$, se calcula la entalpia de alimentación, como se puede observar en la figura 2.16

Localización de la alimentación

Punto Pinch (McCabe - Thiele)

$$z = 0.45$$

$$q = 0.5$$

$$x_P = 0.23$$

$$y_P = 0.67$$

$$H_F^L = -22.5 \text{ kJ/mol}$$

$$H_F^V = 12.5 \text{ kJ/mol}$$

$$H^F = H_F^V - q(H_F^V - H_F^L)$$

$$H^F = 12.5 - 0.5(12.5 - (-22.5))$$

$$H^F = -5 \text{ kJ/mol}$$

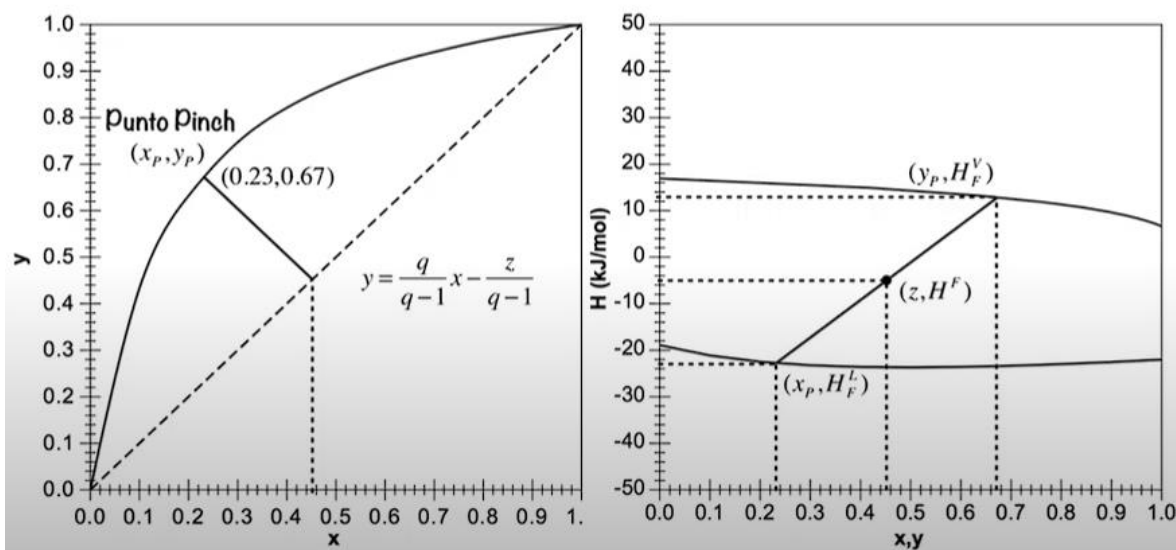


Figura 2.16, localización de la alimentación.

Se prosigue a calcular el reflujo mínimo, dentro del diagrama de entalpia contra x-y, se traza una línea en x_D y en x_B , después se traza una línea en los puntos pinch, hasta tocar las líneas x_D y x_B , esos puntos son P'_{min} y P''_{min} .

Obtenemos la siguiente ecuación que se obtuvo de un balance alrededor del condensador, con la cual se calcula el reflujo $R = \frac{P' - H_1^V}{H_1^V - H_0^L}$, los valores de la entalpia se obtienen de la gráfica mediante los puntos previamente localizados, como se muestra en la figura 2.17

Cálculo de Relación de Reflujo Mínimo

$$R = \frac{P' - H_1^V}{H_1^V - H_0^L}$$

$$P'_{\min} = 35 \text{ kJ/mol}$$

$$P''_{\min} = -39 \text{ kJ/mol}$$

$$H_0^L = -22 \text{ kJ/mol}$$

$$H_1^V = 8 \text{ kJ/mol}$$

$$R_{\min} = 0.9$$

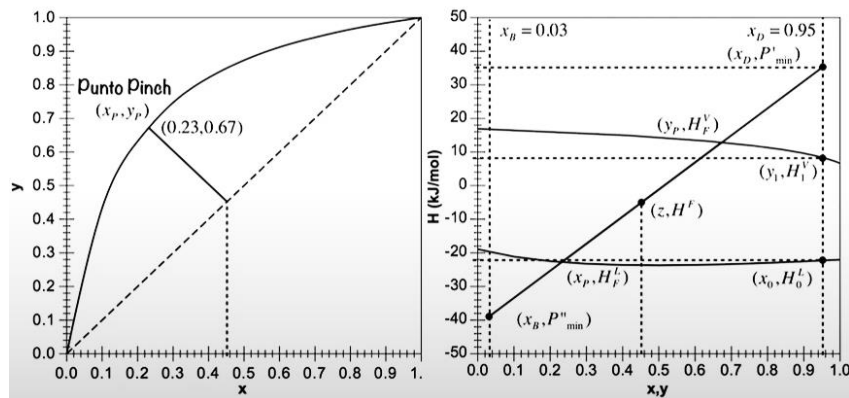


Figura 2.17, Cálculo del reflujo mínimo mediante puntos pinch.

Ahora se calcula el número de etapas con una relación de reflujo mayor a la mínima. Con el reflujo mínimo se calcula el reflujo, y de la ecuación $R = \frac{P' - H_1^V}{H_1^V - H_0^L}$ despejamos P' , obteniendo $P' = H_1^V + R(H_1^V - H_0^L)$, las entalpías ya se tienen del procedimiento anterior.

Al obtener la nueva P' , localizamos el valor en el diagrama entalpía contra x-y, y a partir del punto de P' se traza una línea que cruce por la coordenada de la alimentación, proyectándose hasta tocar la composición de los fondos, como se muestra en la figura 2.18

Cálculo de Número de Etapas de Equilibrio

$$R = 1.3R_{\min} \quad P' = H_1^V + R(H_1^V - H_0^L) \quad P' = 43.1 \text{ kJ/mol}$$

$$R = 1.3(0.9) = 1.17 \quad H_0^L = -22 \text{ kJ/mol}$$

$$R = \frac{P' - H_1^V}{H_1^V - H_0^L} \quad H_1^V = 8 \text{ kJ/mol}$$

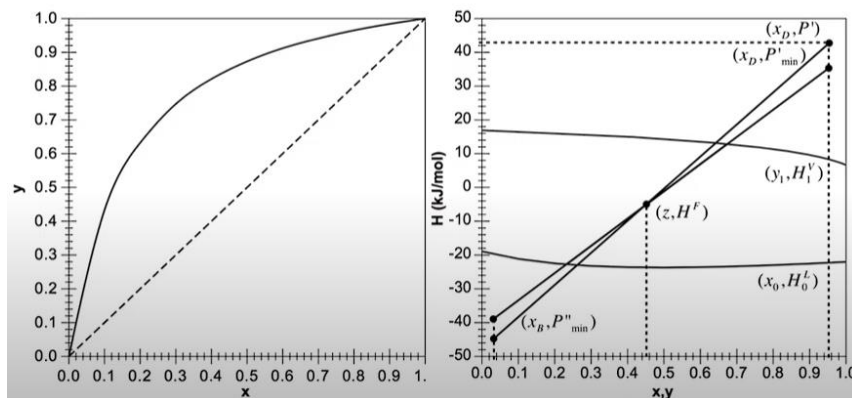


Figura 2.18, cálculo de P' .

A partir de la nueva línea, se trazaran las líneas de balance, la primera será a partir de P' pasando por el flujo de vapor y el flujo de destilado, como se muestra en la figura 2.19, siendo la línea roja.

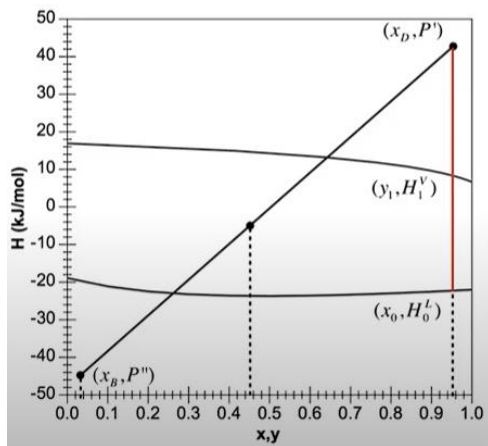


Figura 2.19, línea de balance de P' .

Se obtiene y_1 , con ese valor vamos al diagrama x - y para obtener el valor de x_1 . Con el valor de x_1 , vamos al diagrama de entalpia, y trazo una línea que toca la línea del punto de burbuja uniendo los puntos en equilibrio.

Se calcula la siguiente línea de equilibrio, para la zona de rectificación tenemos la ecuación $V_n H_n^V = L_{n-1} H_{n-1}^L + D P'$, contamos con los valores de y_1 y x_1 , buscando y_2 a partir de estos datos, se traza una línea desde x_1 hasta x_D , y la intersección con la curva de rocío y de balance obtenemos y_2 , como se muestra en la figura 2.20

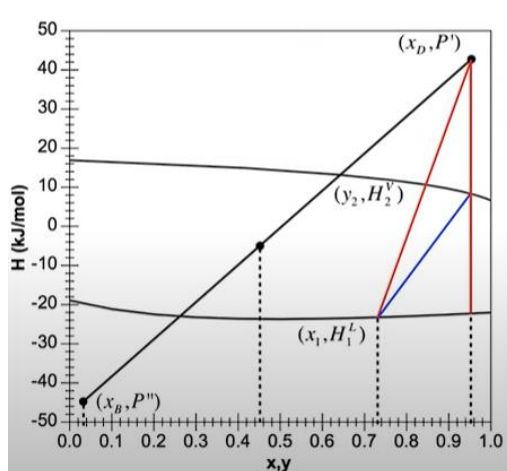


Figura 2.20, obtención de y_2 .

Se repite el procedimiento, con y_2 se obtiene x_2 (figura 2.21), con x_2 se entra al diagrama de entalpía, uniendo los dos puntos y trazando la línea de balance. Se traza la línea con x_2 y x_D , para obtener y_3 , y se vuelve a repetir el proceso para obtener x_3 y y_3 (figura 2.22), y de nuevo para x_4 y y_4 (figura 2.23).

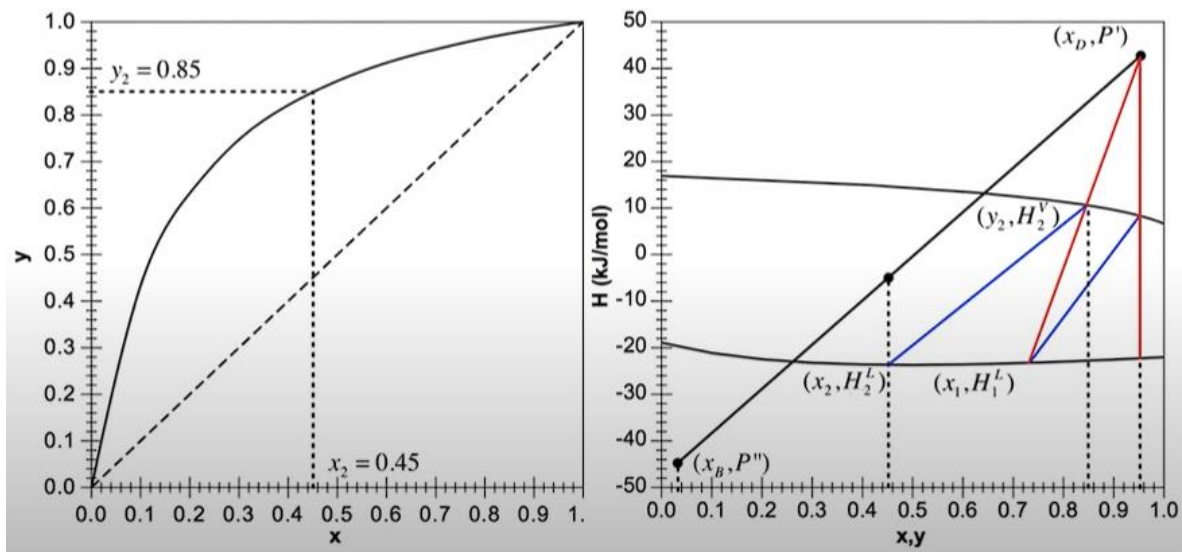


Figura 2.21, obtención de x_2 y y_2 .

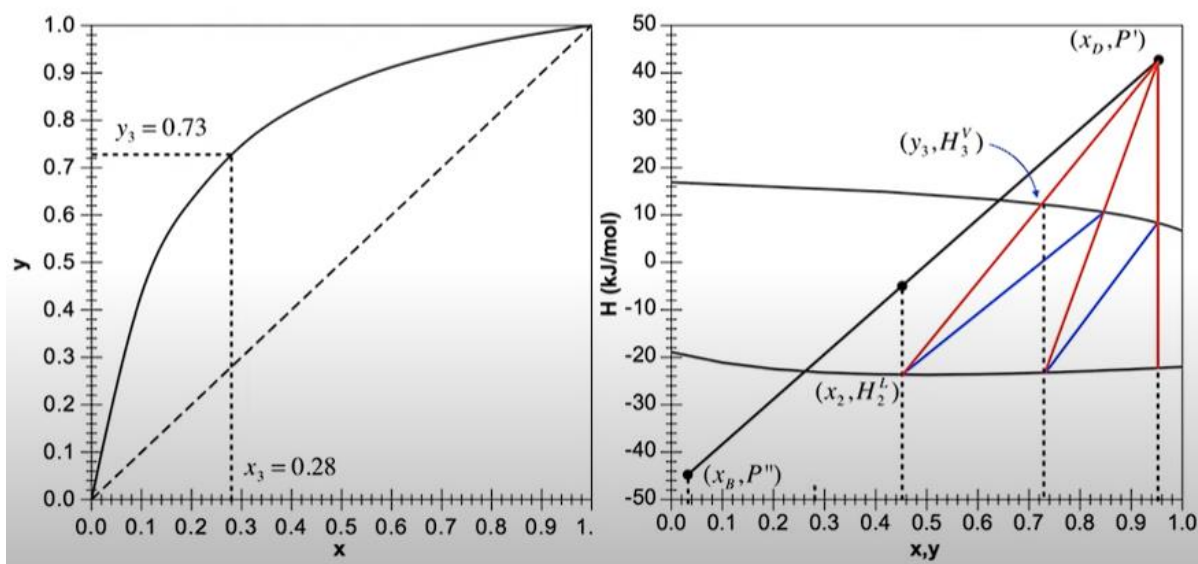


Figura 2.22, obtención de x_3 y y_3 .

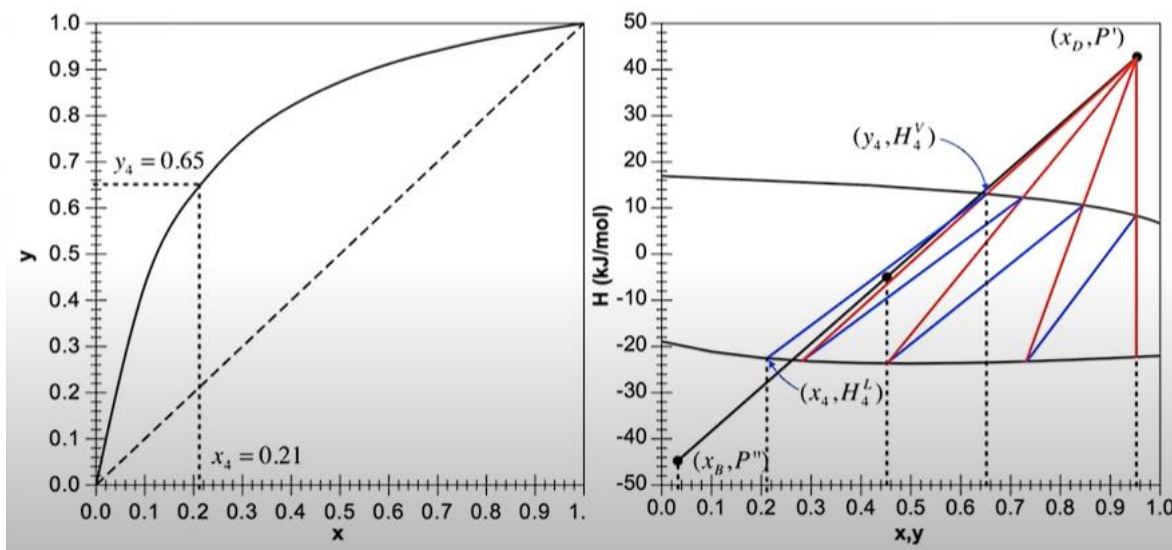


Figura 2.23, obtención de x_4 y y_4 .

Ahora la línea de equilibrio cruza la línea de balance, debemos de cambiar a la zona de agotamiento, ya no se puede seguir trazando líneas a la rectificación. El balance en la zona de agotamiento queda como $\bar{L}_{m-1}H_{m-1}^L = \bar{V}_mH_m^V + BP''$, cual nos permite trazar una línea de x_B a x_4 , y de esta manera obtener y_5 , volviendo a repetir el proceso, como se muestra en la figura 2.24. Repetimos para obtener x_6 y y_6 (figura 2.25), se repite para obtener x_7 y y_7 , y este proceso se repetirá las veces que sea necesario, hasta que el valor de x_n sea igual o menor a x_B (figura 2.26).

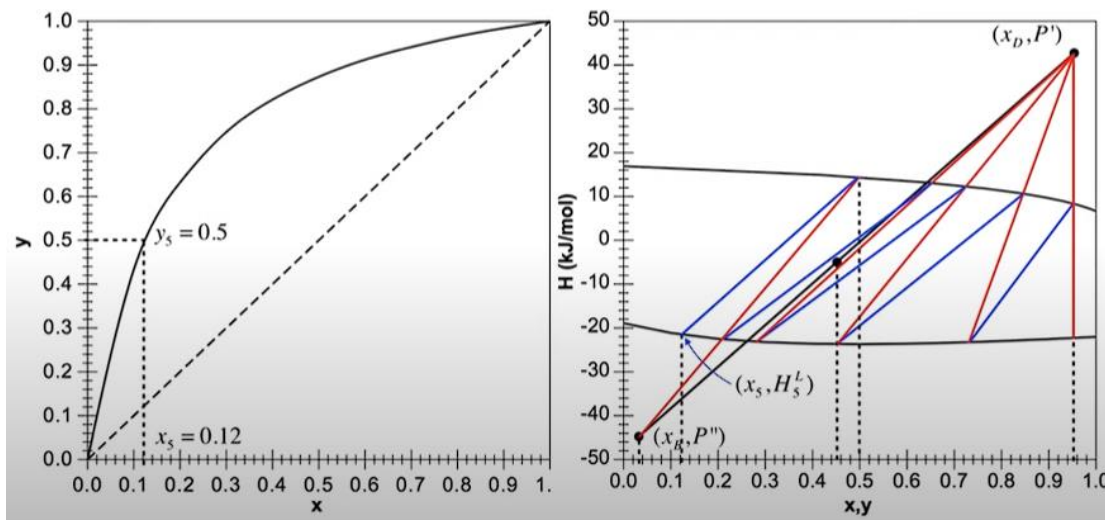


Figura 2.24, obtención de x_5 y y_5 .

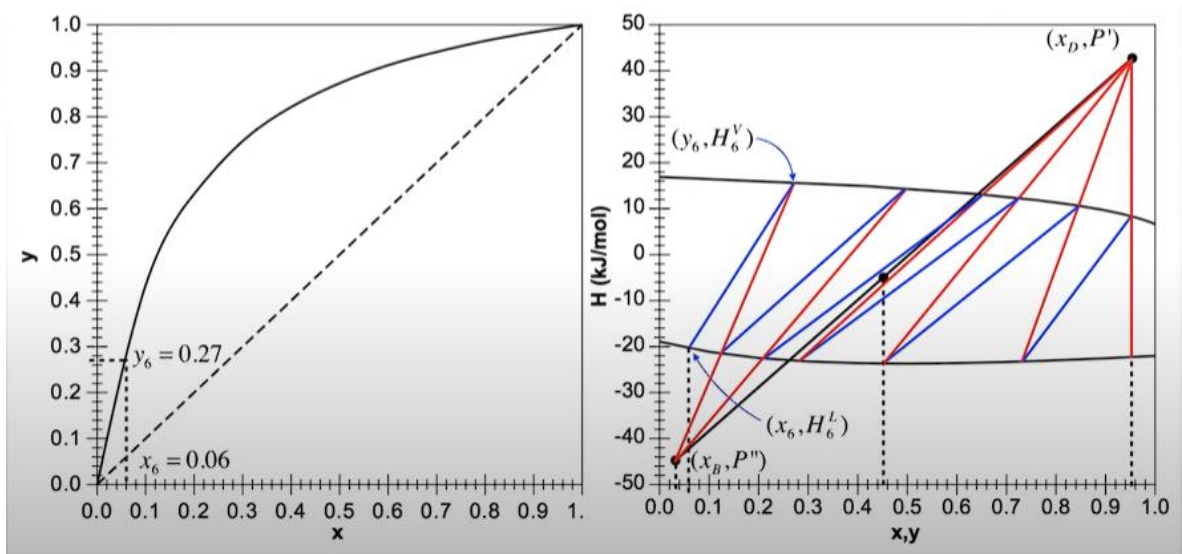


Figura 2.25, obtención de x_6 y y_6 .

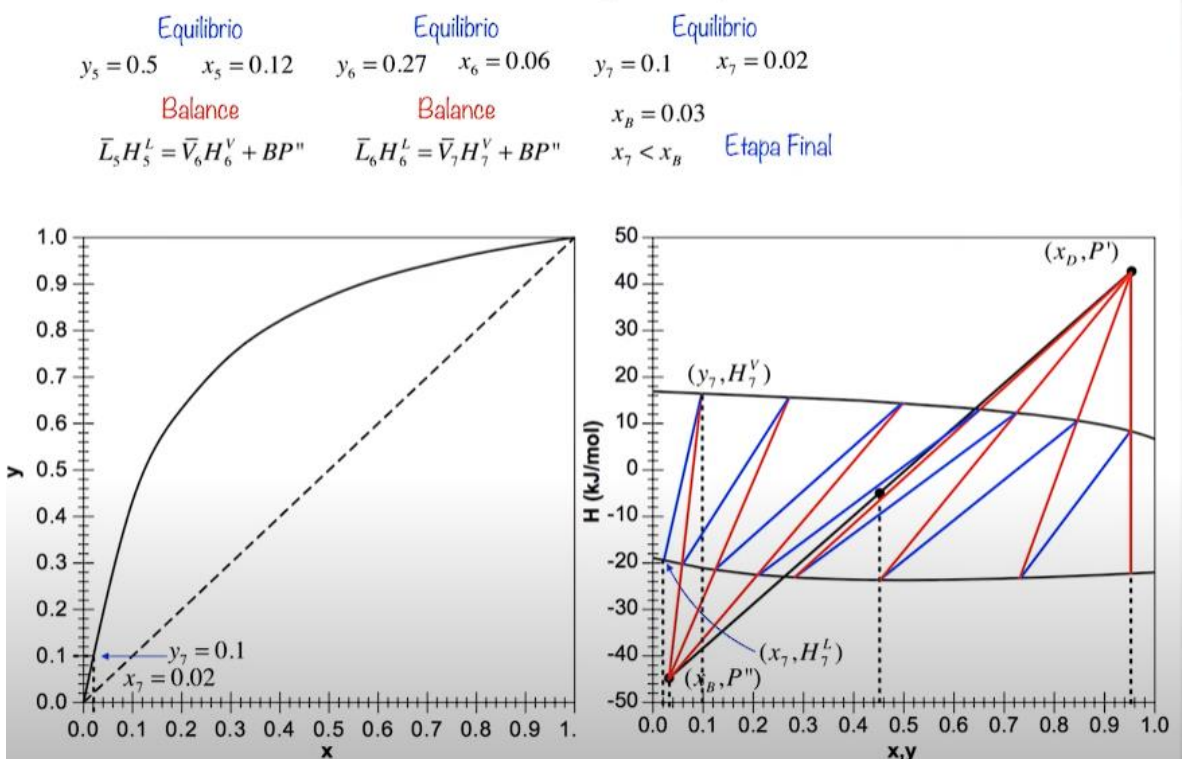


Figura 2.26, obtención de x_7 y y_7 .

Tenemos 7 etapas y la línea de alimentación cruza por la etapa 4, por lo tanto la etapa de alimentación es la 4.

Se realiza el cálculo de las cargas térmicas del condensador y ebullidor, con las siguientes formulas $P' = H^D + \frac{Q_C}{D}$ y $P'' = H^B + \frac{Q_R}{B}$, despejamos Q_C y Q_R , sustituimos valores y obtenemos el resultado (figura 2.26).

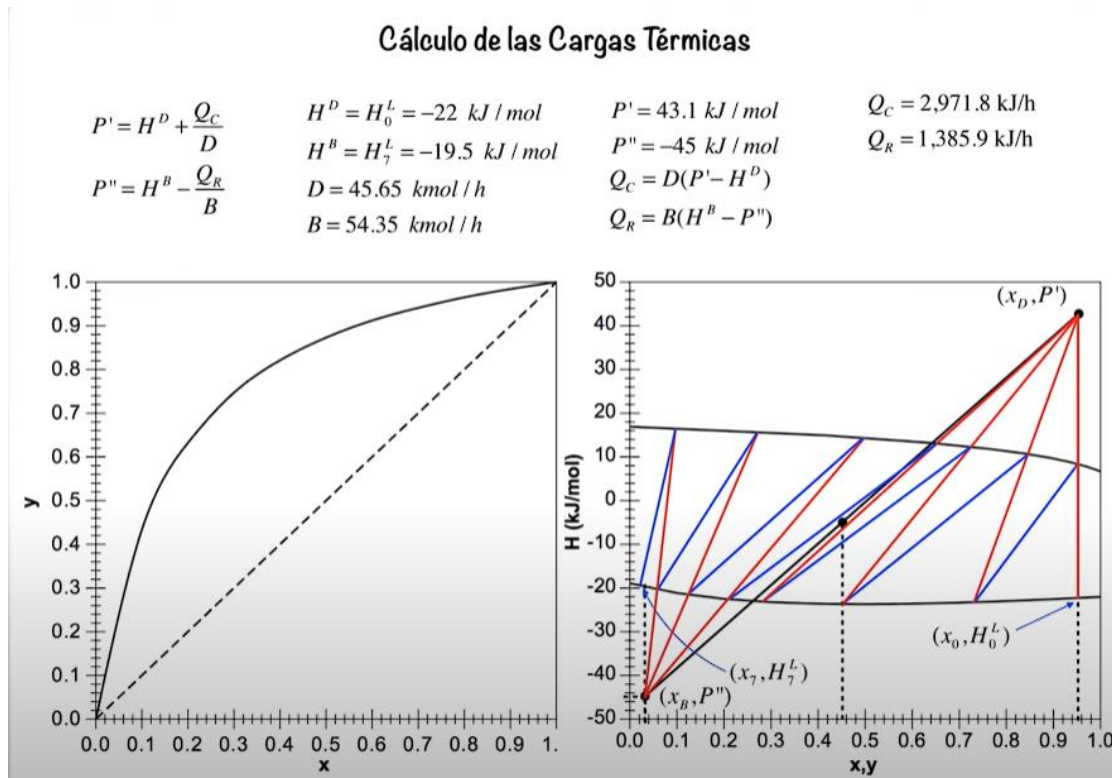


Figura 2.26, cálculo de Q_C y Q_R

El cálculo de numero de etapas mínimas sucede cuando tienes un reflujo igual a ∞ ($N_{min} \rightarrow R_{\infty}$), por lo tanto $P' = \infty$ y $P'' = -\infty$, se traza una línea en xB y xD, y se traza una línea de balance que se va al infinito (línea roja en la figura 2.27).

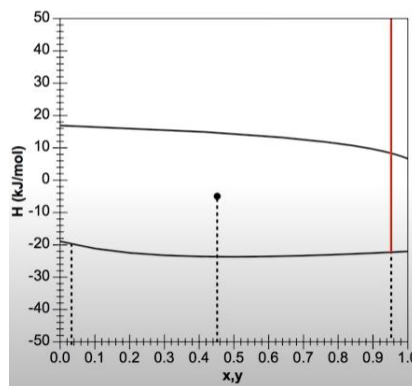


Figura 2.27, línea de balance que tiende a infinito.

Con y_1 obtenemos x_1 , se traza la primer línea de equilibrio y se traza otra línea de balance en P' , que está al infinito por lo cual se traza otra línea (segunda línea roja en figura 2.28).

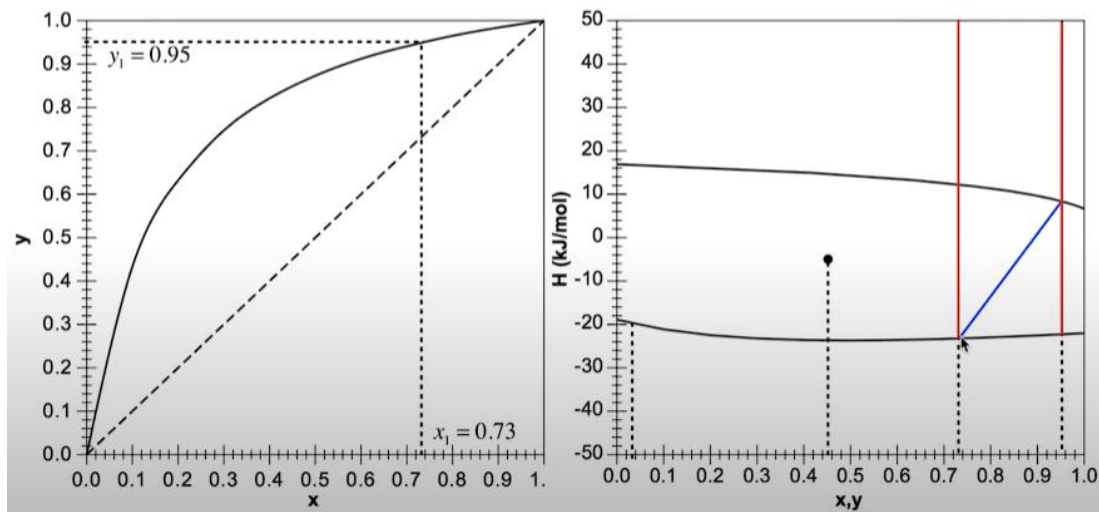


Figura 2.28, se traza P' que tiende a infinito.

Se localiza y_2 y con ella x_2 , trazamos siguiente etapa, pero ya cruza el punto de alimentación y se trazan líneas hasta P'' , llegando hasta x_4 , la cual es menor a x_B (figura 2.29), por lo tanto se obtienen 4 etapas mínimas.

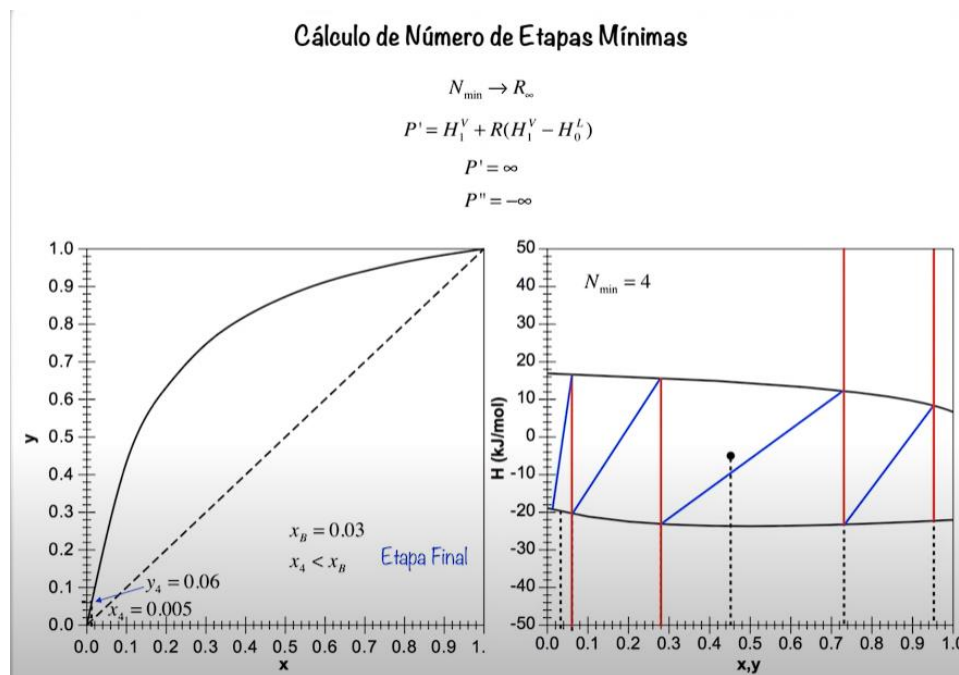


Figura 2.29, cálculo de etapas mínimas.

SIMULACIÓN DE PROCESOS

La simulación de procesos se utiliza en una serie de modelos informáticos para testear de manera virtual métodos y procedimientos. Es importante reconocer que, una simulación es capaz de replicar de manera muy exacta el funcionar de sistemas o procesos reales, a través de modelos; y un modelo está conformado de características del proceso y comportamientos claves, de esta manera la simulación nos muestra el desarrollo del modelo mismo con diferentes condiciones de operación.

Las simulaciones a través de softwares especializados son imprescindibles para casi cualquier industria ya que facilita la experimentación y comprensión de los procesos (Aula 21, 2022).

Los problemas fundamentales para que la ingeniería química busque alternativas económicas y factibles, son los cambios en el medio ambiente y la optimización de energía; en este punto, crear nuevos modelos de simulación de procesos permiten herramientas eficaces y práctica para el análisis, la síntesis y la optimización de proceso lo que ayuda a distinguir las diferentes alternativas para resolver retos modernos de la sociedad.

La principal ventaja que presenta la simulación de procesos es que a partir de datos reales/teóricos, se puede información que permitirán el análisis, la síntesis y la optimización, además no se requiere una gran cantidad de experimentos (lo que incrementa el costo y desestabiliza la operación de cualquier planta de proceso) ya que si el modelo utilizado es adecuado, la reproducibilidad de resultados es excelente (Wordpress, 2022).

CHEMCAD

Es un conjunto integrado de software intuitivo de simulación de procesos químicos que se adapta al flujo de trabajo de ingeniería química y sobrealimenta la eficiencia de un ingeniero.

Beneficios

- Altamente personalizable, flexible y asequible.
- Todos los módulos funcionan dentro de una única interfaz gráfica de usuario para una interacción perfecta.

- Se adapta a cómo abordas los desafíos de ingeniería
- Los gráficos e informes atractivos son fáciles de exportar a software de terceros
- Se integra fácilmente en el entorno informático de ingeniería química.
- Soporte técnico personalizado insuperable.
- Poderosas capacidades de gráfico: curvas de destilación/absorción, diagramas de fases, diagramas presión-temperatura Vs. concentración, gráficas de predicción propiedades físico-químicas Vs. temperatura de corrientes de proceso y de sustancias puras, curvas de calor, ejes logarítmicos, exportación de datos a Excel.
- Modelos de torres sencillas y rigurosas con cortes laterales y equipos (pumparounds, intercambiadores, despojadores laterales)
- Modelos rigurosos de equipos con platos, empaques aleatorios. CHEMCAD no toma atajos, no supone etapas ideales, usa correlaciones rigurosas de transferencia de masa aprobadas por reconocidas instituciones como el AIChE.
- Destilaciones Reactivas con hasta 20 reacciones.
- Herramienta de Optimización de Procesos.
- Conexión con Visual Basic/ Excel que le permite programar sus propias operaciones unitarias dentro del diagrama de proceso (Scientec, 2022) (Wordpress b, 2022).

SCILAB

Es un software de código abierto, multiplataforma y orientado a cálculo numérico y con un lenguaje de programación de alto nivel, por ello puede utilizarse en problemas de simulación para aplicaciones de ingeniería y científicas. Tiene código abierto bajo la licencia CeCILL (GPL compatible), y está disponible bajo GNU / Linux, Mac OS X y Windows XP / Vista / 7/8.

Es similar en su ámbito de aplicación GNU Octave, MATLAB o PsiLAB. Incluye cientos de funciones matemáticas y análisis de datos. Tiene un lenguaje de programación de alto nivel que permite el acceso a estructuras de datos avanzadas, 2-D y funciones gráficas 3-D. Permite resolver problemas de optimización continuos y discretos restringidos y no restringidos, así como algoritmos y herramientas estándar para modelado de sistemas mecánicos, circuitos hidráulicos, sistemas de control (Universidad complutense madrid, 2022) (Technical courses, 2022).

SIMQUIM

Es el primer software didáctico para estudiantes de ingeniería química enfocado al diseño de equipos de proceso, el cual permite llevar a cabo los cálculos termodinámicos y mecánicos para el dimensionamiento de los equipos más comunes en la industria química y petroquímica.

El software se encuentra conformado por módulos independientes enfocados a un equipo en específico cada uno; los cuales suministran al Usuario de toda la información empleada para llevar a cabo los cálculos; como lo son las correlaciones, ecuaciones, parámetros termodinámicos y mecánicos, gráficas, referencias bibliográficas y ayudas que le serán de gran utilidad al estudiante al desear llevar a cabo sus propios cálculos.

Posee además una capacidad de simulación que le permite al Usuario el poder seleccionar o dimensionar modelos de equipos de proveedores industriales a fin de comprender el desempeño que tendrían en una operación real en la industria (Rodriguez, 2022).

ASPEN PLUS

Fomenta el desempeño de procesos químicos usando el mejor software de simulación en su clase para las industrias de químicos a granel, productos químicos de especialidad y farmacéutica. Esta poderosa tecnología de modelado permite la optimización de la cantidad de material procesado, la calidad del producto y en uso de energía en operaciones por lote, continua y combinada (Aspentech, 2022).

Y cuando se vaya a simular una columna, la elección del modelo depende del tipo de aplicación que se trate en el problema, de cuanta complejidad se quiera introducir en el diseño o ajuste de la columna, de si lo que se quiere es efectuar un estudio riguroso o simplemente preliminar y depende asimismo del volumen de resultados que se desee obtener una vez ejecutada la simulación. Por lo cual, existen varios modelos de columnas en ASPEN PLUS para simular en estado estacionario una destilación (Abánades, 2022).

- | | | |
|--------------|--------------|------------|
| 1. DSTWU | 4. Distl | 7. RadFrac |
| 2. Extract | 5. MultiFrac | 8. SCFrac |
| 3. PetroFrac | 6. RateFrac | 9. Batch |

ASPEN HYSYS

Es una de las herramientas de simulación de procesos químicos más utilizadas alrededor del mundo, debido a su potencia, simpleza y eficiencia. Este simulador permite realizar modelos matemáticos de cualquier proceso químico, que pueden ir desde una simple operación unitaria hasta el modelado de plantas industriales completas, incluso de refinerías petroleras, así de completa es esta herramienta de simulación de procesos químicos.

No solo permite realizar simulaciones dinámicas y estados estables, sino que también permite diseñar procesos de modelado de rendimiento y optimización, siendo una verdadera joya dentro de las herramientas de simulación comerciales disponible en el mercado.

Además, que es capaz de realizar la mayoría de los cálculos básicos en ingeniería química, en donde podemos destacar: balance de masa, balance de energía, cálculo de equilibrio líquido-vapor, estimaciones de transferencia de calor o transferencia de masa, además de realizar cálculos de cinética química, fraccionamiento y caída de presión.

Entre las principales aplicaciones que ofrece Aspen Hysys, se pueden destacar las siguientes:

Optimizar la eliminación de gases ácidos; Oferta y estimación de costos; Optimización de procesos de deshidratación; Diseño de destilación; Mejoras de procesos de destilación; Estudios dinámicos de procesos; Gestión de energía; Análisis de seguridad y medioambiental; Análisis de compresión de gas; Diseño de intercambiadores de calor; Optimización integrada de procesos; Mejora integrada del proceso de GNL; Integración con ingeniería de detalles; Mantenimiento de herramientas de planificación; Monitoreo de intercambiadores de calor; Soporte de decisión de operaciones; Implementación del simulador de capacitación del operador; Gestión del rendimiento; Estimación de propiedades físicas; Análisis hidráulico de flujo en tuberías; Análisis de seguridad de procesos; Estimación de costos de proyectos; Planificación de refinerías; Estimación de mezclas; Ajuste de modelos con datos reales de planta (IQR, 2022).

COCO

Es un simulador de uso libre y gratuito y ha sido desarrollado por la empresa Amsterchem con estándares abiertos CAPE-OPEN (Software libre). El simulador de procesos industriales COCO es un simulador que integra los siguientes paquetes:

COFE: Es una interfaz gráfica de usuario intuitiva para flowsheeting química. COFE tiene algoritmo de solución secuencial usando corrientes de desarrollo automático; muestra las propiedades de los flujos, se refiere a la unidad de conversión y proporciona medios de punteo. Los Diagramas de flujo COFE se pueden utilizar como unidades de operación cape-open y como funcionamiento de la unidad interior COFE (diagramas de flujo de diagramas de flujo) o dentro de otros simuladores.

TEA: termodinámica de coco para aplicaciones de ingeniería, se basa en el código de la biblioteca termodinámica de chemsep e incluye un banco de datos de más de 430 de uso común químicos. El paquete exhibe más de 100 métodos de cálculo de propiedad con sus derivados analíticos o numéricos.

CUSCÚS: La unidad de paquete cape-open se envía con operaciones de coco. Contiene un divisor, un mezclador, intercambiadores de calor, bombas y reactores, entre otras operaciones unitarias. Chemsep-lite, una versión limitada de chemsep con un máximo de 40 compuestos y etapas 300, puede servir como una operación de unidad de destilación de equilibrio en coco.

MAÍZ: El paquete numérico react-out open que viene con coco facilita la selección de cualquier tipo de reacción cinética o de equilibrio. Reactores simples, como los reactores de conversión, CSTR y reactores de flujo pistón que pueden usar el paquete de maíz vienen con el paquete de COUSCOUS (Steemit, 2022).

CHEMSEP

Es un simulador de columnas de destilación, absorción y operaciones de extracción con una interfaz fácil e intuitiva. Combina el modelo de columna de etapas de equilibrio clásico con un modelo de columna de no-equilibrio en una interfaz fácil e intuitiva. Su base de datos abarca 400 productos químicos y se puede probar la versión totalmente gratuita limitada a 150 etapas y 10 componentes.

ChemSep sirve para describir o simular un único proceso de separación de componentes y no un conjunto de procesos; no obstante, el programa nos parece muy interesante primero porque funciona muy bien ya que tiene gran cantidad de opciones, porque se puede obtener muchísima información de él una vez finalizada la simulación, ya sea en forma de gráficas o tablas y finalmente porque es muy intuitivo y fácil de utilizar.

Por lo tanto, es muy recomendable para utilizarlo en el caso de la docencia y para aprender los distintos procesos de separación, e incluso en algunos casos como ayuda previa al diseño de estos equipos de separación. Hay que destacar opciones de análisis como el estudio paramétrico o el mapa de curvas de residuo que hacen de este programa una elección más que recomendable (Chemsep, 2022).

MATLAB

Es una plataforma de programación y cálculo numérico utilizada por millones de ingenieros y científicos para analizar datos, desarrollar algoritmos y crear modelos.

Es un sistema de cómputo numérico que ofrece un entorno de desarrollo integrado (IDE) con un lenguaje de programación propio (lenguaje M). Está disponible para las plataformas Unix, Windows, macOS y GNU/Linux.

Entre sus prestaciones básicas se hallan la manipulación de matrices, la representación de datos y funciones, la implementación de algoritmos, la creación de interfaces de usuario (GUI) y la comunicación con programas en otros lenguajes y con otros dispositivos hardware.

Las aplicaciones de MATLAB se desarrollan en un lenguaje de programación propio. Este lenguaje es interpretado, y puede ejecutarse tanto en el entorno interactivo, como a través de un archivo de script (archivos *.m). Este lenguaje permite operaciones de vectores y matrices, funciones, cálculo lambda, y programación orientada a objetos (Mathworks, 2022).

INTERFAZ CON OTROS LENGUAJES DE PROGRAMACIÓN

Puede llamar funciones y subrutinas escritas en C o Fortran, además se crea una función envoltorio que permite que sean pasados y devueltos tipos de datos de MATLAB. Los archivos objeto dinámicamente cargables creados compilando esas funciones se denominan MEX-files, aunque la extensión de nombre de archivo depende del sistema operativo y del procesador (Wikipedia, 2022b).

OCTAVE

El proyecto fue creado alrededor del año 1988, pero con una finalidad diferente: ser utilizado en un curso de diseño de reactores químicos. Posteriormente, en el año 1992, se decidió extenderlo, y comenzó su desarrollo a cargo de John W. Eaton. La primera versión alpha fue lanzada el 4 de enero de 1993. Un año más tarde, el 17 de febrero de 1994, apareció la versión 1.0.

El nombre surge de **Octave Levenspiel**, profesor de uno de los autores y conocido por sus buenas aproximaciones, por medio de cálculos elementales, a problemas numéricos en ingeniería química (Wikipedia, 2022c).

Octave es un lenguaje de alto nivel, destinado principalmente a cálculos numéricos, y es parte del proyecto GNU (es un proyecto colaborativo de software libre con el objetivo de crear un sistema operativo completamente libre). Este lenguaje proporciona capacidades para la resolución numérica de problemas lineales y no lineales, y para realizar otras pruebas numéricas. También proporciona capacidades gráficas extensas para la visualización y manipulación de datos.

Se utiliza normalmente a través de su interfaz de línea de comandos interactiva, pero también se puede utilizar para escribir programas no interactivos. El lenguaje de programación Octave es bastante similar a Matlab, por lo que la mayoría de los programas son reutilizables en este lenguaje (Ucodemy, 2022).



EDUCACIÓN
SECRETARÍA DE EDUCACIÓN PÚBLICA



TECNOLÓGICO
NACIONAL DE MÉXICO®



CAPITULO III

DESARROLLO

CAPITULO III. DESARROLLO

En la línea 4 (figura 3.1) se inicializan las variables de entrada; fracción líquido-vapor de alimentación, composición de alimentación, composición de destilados, composición de residuos, relación de reflujo con respecto al reflujo mínimo y el número máximo de etapas calculables (se definen para que el cálculo de etapas no tienda al infinito).

```
4 f=0; xF=0.3; xD=0.75; xR=0.01; RD_Rm=2; nEmax=100;
```

Figura 3.1, variables de entrada.

De la línea 6 a 10 (figura 3.2.) es un menú en donde el número que definamos es la manera en que se va a graficar, ya sea para mostrar únicamente el método de Ponchon-Savarit, diagrama de etapas x-y, perfiles de temperatura o una comparativa de las anteriores.

```
6 GRAFICA=4;  
7 % 1 Ponchon-Savarit  
8 % 2 Etapas diagrama x-y  
9 % 3 Perfil de temperatura
```

Figura 3.2, menú de gráficas.

De la línea 12 a 14 (figura 3.3) se introducen los datos de equilibrio líquido-vapor-temperatura.

```
12 xA_T = [0 0.02 0.05 0.1 0.2 0.3 0.4 0.5 0.6 0.7 0.8 0.9 0.94 0.96 0.98 1];  
13 yA_T = [0 0.192 0.3877 0.527 0.656 0.713 0.746 0.771 0.794 0.822 0.858 0.912 0.942 0.959 0.978 1];  
14 T     = [100 98.1 95.2 91.8 87.3 84.7 83.2 82 81 80.1 79.1 78.3 78.2 78.1 78.2 78.3];
```

Figura 3.3, datos de equilibrio de temperatura.

De la línea 16 a 21 (figura 3.4) se introducen los datos líquido-vapor-entalpía y los pesos moleculares.

```
16 xA_H = [0 0.1 0.3 0.5 0.7 0.9 1];
17 yA_H = [0 0.1 0.3 0.5 0.7 0.9 1];
18 Hx   = [418.9 371.7 314.0 285.9 258.4 224.7 207];
19 Hy   = [2675 2517 2193 1870 1544 1223 1064];
20 PMA=46.07;
21 PMB=18.01528;
```

Figura 3.4 Datos de equilibrio de entalpía.

De la línea 23 a 27 (figura 3.5) se convierten las fracciones masa a fracción molar.

```
23 xA_T=(xA_T/PMA) ./ ((xA_T/PMA) + ((1-xA_T)/PMB));
24 yA_T=(yA_T/PMA) ./ ((yA_T/PMA) + ((1-yA_T)/PMB));
25
26 xA_H=(xA_H/PMA) ./ ((xA_H/PMA) + ((1-xA_H)/PMB));
27 yA_H=(yA_H/PMA) ./ ((yA_H/PMA) + ((1-yA_H)/PMB));
```

Figura 3.5 Cálculo para convertir fracción masa a fracción molar.

De la línea 29 a 32 (figura 3.6) se realiza una interpolación cubica para la gráfica del diagrama composición-entalpía.

```
29 xC=linspace(0,1,500);
30 yC=spline(xA_T,yA_T,xC);
31 HxC=spline(xA_H,Hx,xC);
32 HyC=spline(yA_H,Hy,yC);
```

Figura 3.6, código para interpolación cúbica.

En la línea 34 (figura 3.7) se define “apagar” los resultados a utilizar en el solver. En la línea 35 a 39 (figura 3.7) se define el punto de intersección de alimentación.

```
34 options = optimset('Display','off');  
35 if f==0  
36     xFf=xF;  
37 else  
38     xFf=fsolve(@(x,y) spline(xA_T,yA_T,x)+(1-f)./f*x-xF./f,xF,options);  
39 end
```

Figura 3.7 código para definir la intersección de alimentación.

En la línea 40 a 42 (figura 3.8) utilizando interpolación cubica se encuentra el punto de intersección de la alimentación en el diagrama de composición-entalpía para x-y (liquido-vapor). Así mismo se encuentra el valor de equilibrio para el vapor.

```
40 yFf=spline(xA_T,yA_T,xFf);  
41 Hxf=spline(xA_H,Hx,xFf);  
42 Hyf=spline(yA_H,Hy,yFf);
```

Figura 3.8, código para el equilibrio del vapor.

En la línea 43 (figura 3.9) se calcula la entalpía de alimentación. En la 44 a 47 se calcula la interpolación cúbica de la entalpía del destilado y el residuo para su fase líquida y vapor.

```
43 HfF=(1-f)*Hxf+f*Hyf;  
44 HxD=spline(xA_H,Hx,xD);  
45 HyD=spline(yA_H,Hy,xD);  
46 HxR=spline(xA_H,Hx,xR);  
47 HyR=spline(yA_H,Hy,xR);
```

Figura 3.9 Calculo de entalpías

En las líneas 48 y 49 (figura 3.10) son líneas que van desde el punto de alimentación a la línea de equilibrio para líquido y vapor, dentro del diagrama composición entalpía.

```
48 LEFx=[xFf yFf];  
49 LEFy=[Hxf Hyf];
```

Figura 3.10, líneas en el diagrama de entalpía.

En la línea 50 a 51 (figura 3.11) se definen los puntos Q1 y Q2 relativos. En la línea 55 se calcula la relación del reflujo mínimo.

```
50 Q1m=spline (LEFx,LEFy,xD) ;  
51 Q2m=spline (LEFx,LEFy,xR) ;  
52  
53  
54  
55 Rm= (Q1m-HyD) / (HyD-HxD) ;
```

Figura 3.11, cálculo de reflujo mínimo.

En la línea 57 (figura 3.12) se calcula la relación de reflujo operativo. En la línea 58 a 59 se calcula Q1 y Q2 operativos (puntos a ser graficados).

```
57 RD=RD_Rm*Rm ;  
58 Q1=RD* (HyD-HxD) +HyD ;  
59 Q2=spline ( [xD xF] , [Q1 HfF] , xR) ;
```

Figura 3.12, cálculo de relación de reflujo operativo.

En la línea 60 a 61 (figura 3.13) se establecen 2 vectores para calcular las líneas iniciales del método.

```
60 L1x=[xD xD xD xF xR xR xR] ;  
61 L1y=[HxD HyD Q1 HfF Q2 HxR HyR] ;
```

Figura 3.13 establecimiento de vectores.

En la línea 63 a 66 (figura 3.14) se inicializan los puntos de equilibrio para comenzar a trazar el número de etapas teóricas.

```
63 yE (1,1)=xD ;  
64 HyE=HyD ;  
65 LEQx=[xD;xD] ;  
66 LEQy=[HxD;Q1] ;
```

Figura 3.14, puntos de equilibrio.

En la línea 69 a 70 (figura 3.15.) se calcula el valor de equilibrio en el líquido proveniente del cálculo previo de la composición del vapor en el equilibrio. Se calcula por interpolación cubica el valor de la entalpia para la comparación del líquido en equilibrio.

```
69 xE(1,i)=fsolve(@(x,y) spline(xA_T,yA_T,x)-yE(1,i),0,options);  
70 HxE(1,i)=spline(xA_H,Hx,xE(1,i));
```

Figura 3.15, interpolación cubica

En la línea 71 a 73 (figura 3.16) define el criterio para detener el cálculo de etapas cuando la composición del líquido es menor a la composición del residuo.

```
71 if xE(1,i)<xR  
72     break  
73 end
```

Figura 3.16, define el criterio para detener el cálculo de las etapas.

En la línea 74 (figura 3.17) se define un condicional que decide en qué momento se calculan las etapas para la zona de enriquecimiento (composición de líquido mayor a la de alimentación).

En la línea 75 a 78 (figura 3.17) para el enriquecimiento se estiman los valores utilizando la línea resultante con respecto a Q_1 y posteriormente calcular el valor de entalpia y almacenarlo en los vectores para la línea de equilibrio tanto para x como para y.

```
74 if xE(1,i)>xF  
75     yE(1,i+1)=fsolve(@(y,H) spline([xE(1,i) xD],[HxE(1,i) Q1],y)-spline(yA_H,Hy,y),xE(1,i),options);  
76     HyE(1,i+1)=spline(yA_H,Hy,yE(1,i+1));  
77     LEQx=[LEQx [xE(1,i);xD]];  
78     LEQy=[LEQy [HxE(1,i);Q1]];
```

Figura 3.17 condicional if para el cálculo de etapas.

En la línea 79 a 83 (figura 3.18.) es al no cumplirse las condiciones del if, se ejecuta el mismo cálculo en la sección de enriquecimiento, solo que para la sección de agotamiento se utiliza como punto de referencia Q_2 .

```

79     else
80         yE(1,i+1)=fsolve(@(y,H) spline([xE(1,i) xR],[HxE(1,i) Q2],y)-spline(yA_H,Hy,y),xE(1,i),options);
81         HyE(1,i+1)=spline(yA_H,Hy,yE(1,i+1));
82         LEQx=[LEQx [yE(1,i+1);xR]];
83         LEQy=[LEQy [HyE(1,i+1);Q2]];

```

Figura 3.18 condicional else para el cálculo de etapas.

En la línea 87 a 91 (figura 3.19.) se definen parámetros útiles para la gráfica.

```

87     No_f=i;
88     Enx=[xE;yE(1,1:length(xE))];
89     Eny=[HxE;HyE(1,1:length(HxE))];
90     NoEx=(xE+yE)/2;
91     NoEy=(HxE+HyE)/2;

```

Figura 3.19, parámetros de gráfica.

En la línea 96 a 226 (figura 3.20) se utiliza un switch para separar los 4 casos de gráficas, en dado caso de requerir más información, consultar el anexo A.1

```

96     switch GRAFICA
97     case 1
98         plot(xC,HxC,'-b',yC,HyC,'-r',L1x,L1y,'-ok',xE,HxE,'ob',...
99             yE,HyE,'or',LEQx,LEQy,'-k',Enx,Eny,':k',xF,HfF,'*g')
100         title('Método de Ponchon-Savarit')
101         xlabel('Fraccion x-y')
102         ylabel('Entalpia')
103         for j=1:1:i
104             No=j;
105             text(NoEx(j),NoEy(j),strcat('E',int2str(No)))
106         end
107         text(xD,HxD-10000,strcat('xD = ',num2str(xD)))
108         text(xF,HfF-10000,strcat('xF = ',num2str(xF)))
109         text(xR,HxR-10000,strcat('xR = ',num2str(xR)))
110         text(xD+0.02,Q1,'Q1')
111         text(xR+0.02,Q2,'Q2')
112     case 2
113         yn=Enx(2,:);
114         xn=Enx(1,:);
115         E_MCx=[xD];
116         E_MCy=[xD];
117         for i=1:1:No_f
118             E_MCx=[E_MCx xn(i)];
119             E_MCy=[E_MCy yn(i)];
120             if i==No_f
121                 else

```

Figura 3.20, switch para separar las diferentes gráficas.



EDUCACIÓN
SECRETARÍA DE EDUCACIÓN PÚBLICA



TECNOLÓGICO
NACIONAL DE MÉXICO®



TESCO
TECNOLÓGICO
DE ESTUDIOS
SUPERIORES
DE COAHUILA

CAPITULO IV

RESULTADOS

CAPITULO IV. RESULTADOS

A continuación, se resolverán algunos ejemplos de separación de mezclas binarias por destilación, utilizando el método de Ponchon-Savarit a través del software “Enthalpy distillation”.

Ejemplo 1 Separación de una mezcla benceno-tolueno

Se alimenta líquido saturado de una mezcla con 45%mol benceno y 55%mol tolueno a una columna de destilación atmosférica, el destilado deberá contener 95%mol benceno y los fondos deberán contener 10%mol benceno, la relación de reflujo es $RD=1.2908 \cdot RD_{min}$.

- Determinar el número de etapas teóricas necesarias para llevar a cabo la separación
- Realizar el diagrama composición entalpia y trazar el método de Ponchin-Savarit
- Determinar el perfil de concentración análogo al método McCabe-Thile utilizando el diagrama x-y
- Determinar el perfil temperatura con respecto al número de etapas (n_i vs T)

Al ser liquido saturado la fracción de vapor f deberá ser cero, se introducen los datos de las composiciones de alimentación, destilado y fondos x_F , x_D y x_R respectivamente, así como la relación de reflujo con respecto al reflujo mínimo, esto se ilustra en la figura 4.1

```
*****  
f=0; xF=0.45; xD=0.95; xR=0.10; RD_Rm=1.2908; nEmax=100;  
*****
```

Figura 4.1 Parámetros iniciales (benceno-tolueno).

Se introducen los datos de equilibrio líquido vapor (T-xy), así como los datos de entalpia-concentración (H-xy) como se muestra en la figura 4.2

```
*****  
xA_T = [1.0 0.78 0.581 0.411 0.258 0.13 0];  
yA_T = [1.0 0.9 0.777 0.632 0.456 0.261 0];  
T     = [353.3 358.2 363.2 368.2 373.2 378.2 383.2];  
*****  
xA_H = [0 0.3 0.5 0.8 1];  
yA_H = [0 0.3 0.5 0.8 1];  
Hx    = [5109 2920 1820 562 0];  
Hy    = [38439 36268 34716 32380 30820 ];  
-----
```

Figura 4.2 Datos de equilibrio y entalpia (vencen-tolueno)

El software “Enthalpy distillation” arroja los resultados mostrados en la figura 4.3

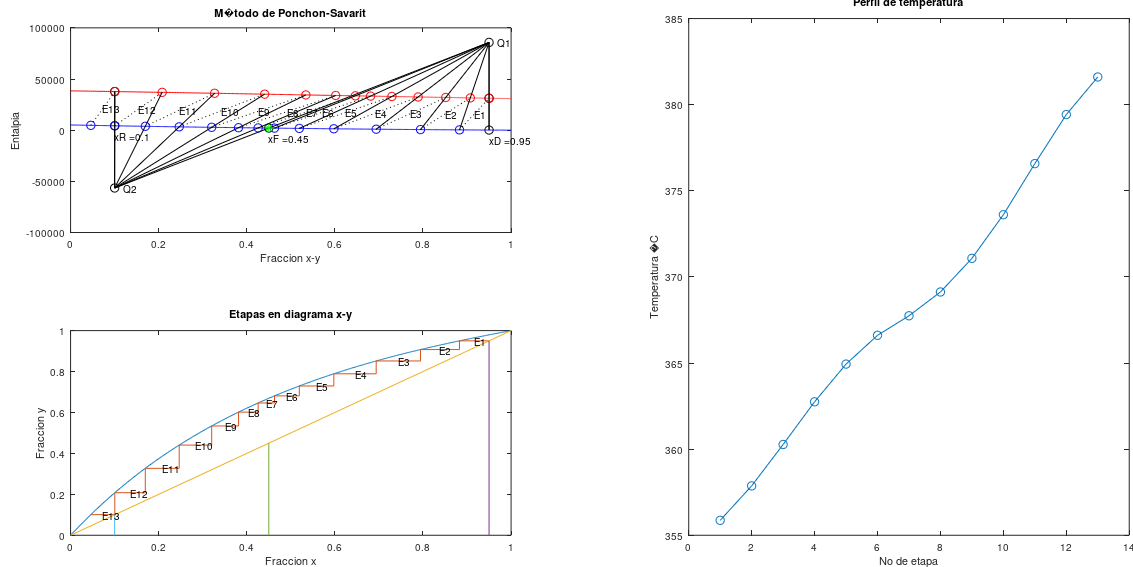


Figura 4.3 Resumen de resultados (benceno-tolueno).

Los resultados pueden ser mostrados de 4 formas posibles; una comparativa grafica del método ponchon-savarit, diagrama x-y y el perfil de temperatura con respecto a las etapas; también se pueden seleccionar la opción de representar los resultados de forma gráfica e individual; para decidir que grafica queremos ver o si la comparación de las 3, deberemos escribir el número correspondiente como se muestra en la figura 4.4

```
GRAFICA=4;
% 1 Ponchon-Savarit
% 2 Etapas digramma x-y
% 3 Perfil de temperatura
% 4 Comparativa
.....
```

Figura 4.4 Menú para la selección de representación gráfica.

Podemos observar en la figura 4.5 un punto verde (xF) situado sobre la línea azul (liquido saturado) este representa la fracción de la corriente de alimentación, a continuación, se identifica la fracción xD (derecha) y xR (izquierda), trazando una línea vertical cortando la línea de líquido y vapor saturado.

En la figura 4.5 se observa la resolución del método de ponchon-savarit, la línea vertical que pasa por xD se corta con Q1 y la línea de líquido saturado, la distancia entre estos dos puntos representa el calor que debe de ser retirado para condensar el destilado, sobre la recta vertical que pasa por xR, la distancia entre el punto Q2 y el punto que corta a la línea de vapor saturado es la cantidad de calor

requerido que debe suministrar el reboiler, las líneas punteadas que unen la línea de líquido saturado y vapor saturado representan la relación entre las etapas en equilibrio.

Las líneas que van desde Q1 hasta la línea de líquido saturado representan un balance gráfico de materia y energía en la zona de rectificación, a su vez las líneas que van desde el punto Q2 a la línea de vapor saturado representan el balance gráfico de materia y energía en la zona de agotamiento, la línea punteada que es cortada por la línea que conecta Q1 y Q2 será la etapa de alimentación, como podemos observar en la figura 4.5, la etapa 7 es la etapa de alimentación, la etapa 13 es la etapa final ya que su concentración en el líquido saturado es menor al residuo (queda a la izquierda de la línea vertical xR).

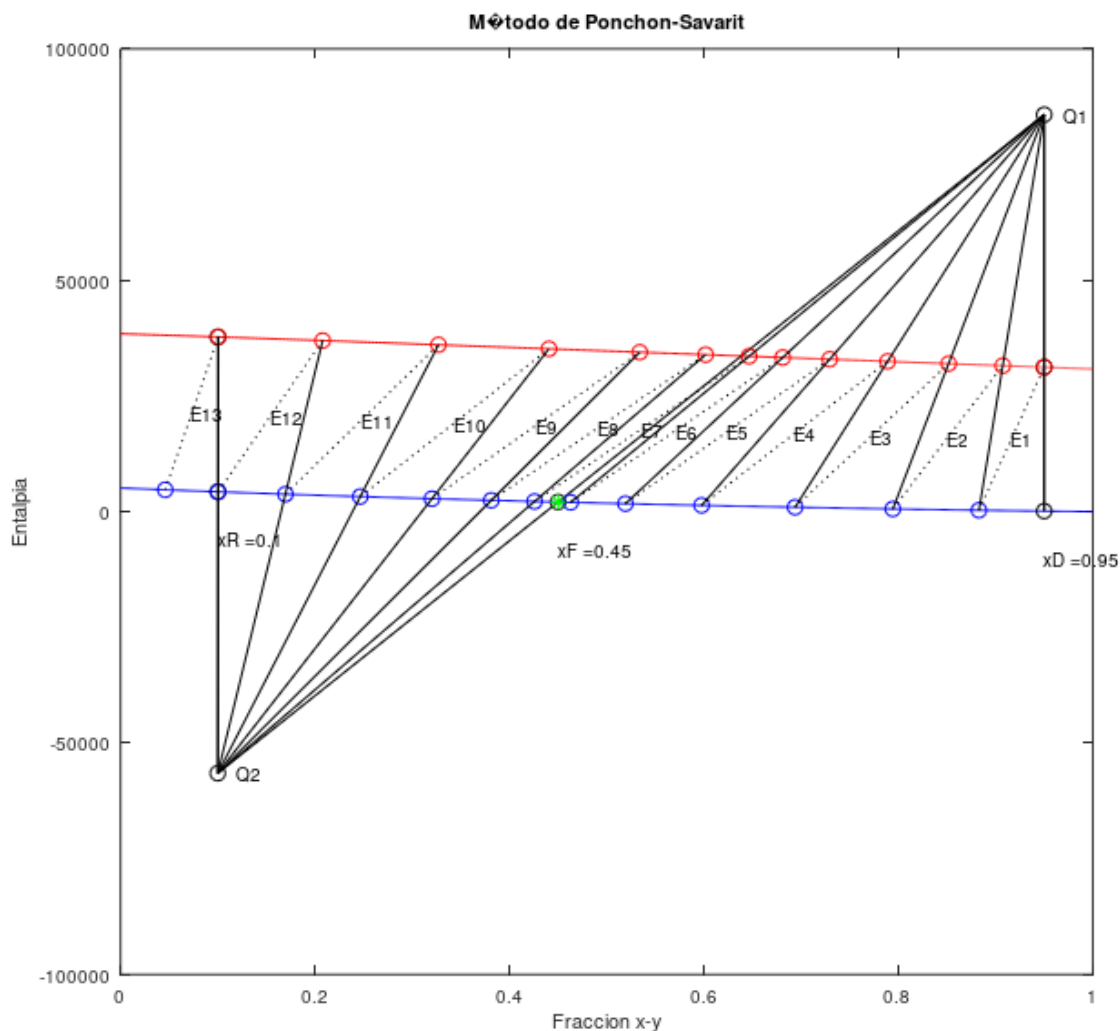


Figura 4.5 Resolución de método ponchon-savarit, benceno-tolueno

Ejemplo 2 Separación de una mezcla etanol-agua

Se alimenta líquido saturado de una mezcla con 30% w/w etanol y 70% w/w agua a una columna de destilación atmosférica, el destilado deberá contener 75% w/w etanol y los fondos deberán contener 1% w/w etanol, la relación de reflujo es $RD=2*RD_{min}$.

- Determinar el número de etapas teóricas necesarias para llevar a cabo la separación
- Realizar el diagrama composición entalpia y trazar el método de Ponchin-Savarit
- Determinar el perfil de concentración análogo al método McCabe-Thiele utilizando el diagrama x-y
- Determinar el perfil temperatura con respecto al número de etapas (n_i vs T)

la fracción de vapor f deberá ser cero ya que es un líquido saturado, se introducen los datos de las composiciones de alimentación, destilado y fondos x_F , x_D y x_R respectivamente, así como la relación de reflujo con respecto al reflujo mínimo, esto se ilustra en la figura 4.6.

```
*****  
f=0; xF=0.3; xD=0.75; xR=0.01; RD_Rm=2; nEmax=100;  
*****
```

Figura 4.6 Parámetros iniciales

Se vacían los datos de equilibrio líquido-vapor (T -xy), así como los datos de entalpia-concentración (H -xy) y pesos moleculares (ya que los datos de equilibrio están en fracción masa y se deberán de convertir en fracción mol), como se muestra en la figura 4.7.

```
*****  
xA_T = [0 0.02 0.05 0.1 0.2 0.3 0.4 0.5 0.6 0.7 0.8 0.9 0.94 0.96 0.98 1];  
yA_T = [0 0.192 0.377 0.527 0.656 0.713 0.746 0.771 0.794 0.822 0.858 0.912 0.942 0.959 0.978 1];  
T     = [100 98.1 95.2 91.8 87.3 84.7 83.2 82 81 80.1 79.1 78.3 78.2 78.1 78.2 78.3];  
*****  
xA_H = [0 0.1 0.3 0.5 0.7 0.9 1];  
yA_H = [0 0.1 0.3 0.5 0.7 0.9 1];  
Hx    = [418.9 371.7 314.0 285.9 258.4 224.7 207];  
Hy     = [2675 2517 2193 1870 1544 1223 1064];  
PMA=46.07;  
PMB=18.01528;
```

Figura 4.7 Datos de equilibrio, entalpia y peso molecular de los componentes.

El software “Enthalpy distillation” arroja los resultados mostrados en la figura 4.8.

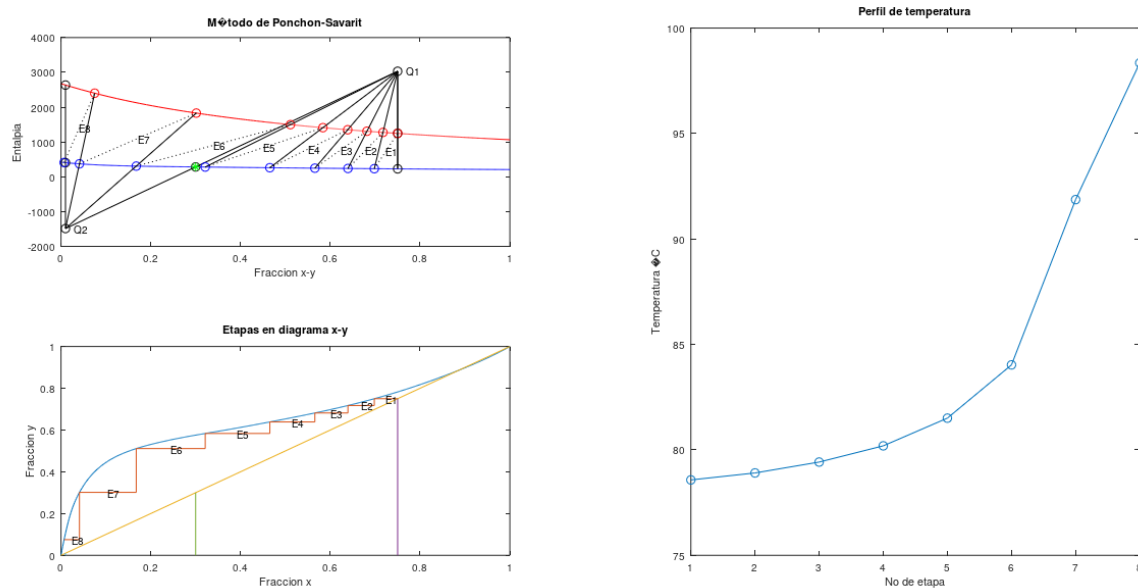


Figura 4.8 resumen de resultados (etanol-agua)

Los resultados pueden ser mostrados de 4 formas posibles; una comparativa grafica del método ponchon-savarit, diagrama x-y y el perfil de temperatura con respecto a las etapas; también se pueden seleccionar la opción de representar los resultados de forma gráfica e individual; para decidir que grafica queremos ver o si la comparación de las 3, deberemos escribir el número correspondiente como se muestra en la figura 4.9

```
GRAFICA=4;
% 1 Ponchon-Savarit
% 2 Etapas diagrama x-y
% 3 Perfil de temperatura
% 4 Comparativa
.....
```

Figura 4.9 Menú para la selección de representación gráfica.

Podemos observar en la figura 4.10 un punto verde (x_F) situado sobre la línea azul (líquido saturado) este representa la fracción de la corriente de alimentación, a continuación, se identifica la fracción x_D (derecha) y x_R (izquierda), trazando una línea vertical cortando la línea de líquido y vapor saturado.

En la figura 4.10 se observa la resolución del método de ponchon-savarit, la línea vertical que pasa por x_D se corta con Q_1 y la línea de líquido saturado, la distancia entre estos dos puntos representa el calor que debe de ser retirado para condensar el destilado, sobre la recta vertical que pasa por x_R ,

la distancia entre el punto Q2 y el punto que corta a la línea de vapor saturado es la cantidad de calor requerido que debe suministrar el reboiler, las líneas punteadas que unen la línea de líquido saturado y vapor saturado representan la relación entre las etapas en equilibrio.

Las líneas que van desde Q1 hasta la línea de líquido saturado representan un balance gráfico de materia y energía en la zona de rectificación, a su vez las líneas que van desde el punto Q2 a la línea de vapor saturado representan el balance gráfico de materia y energía en la zona de agotamiento, la línea punteada que es cortada por la línea que conecta Q1 y Q2 será la etapa de alimentación, como podemos observar en la figura 4.10, la etapa 6 es la etapa de alimentación, la etapa 8 es la etapa final ya que su concentración en el líquido saturado es menor al residuo (queda a la izquierda de la línea).

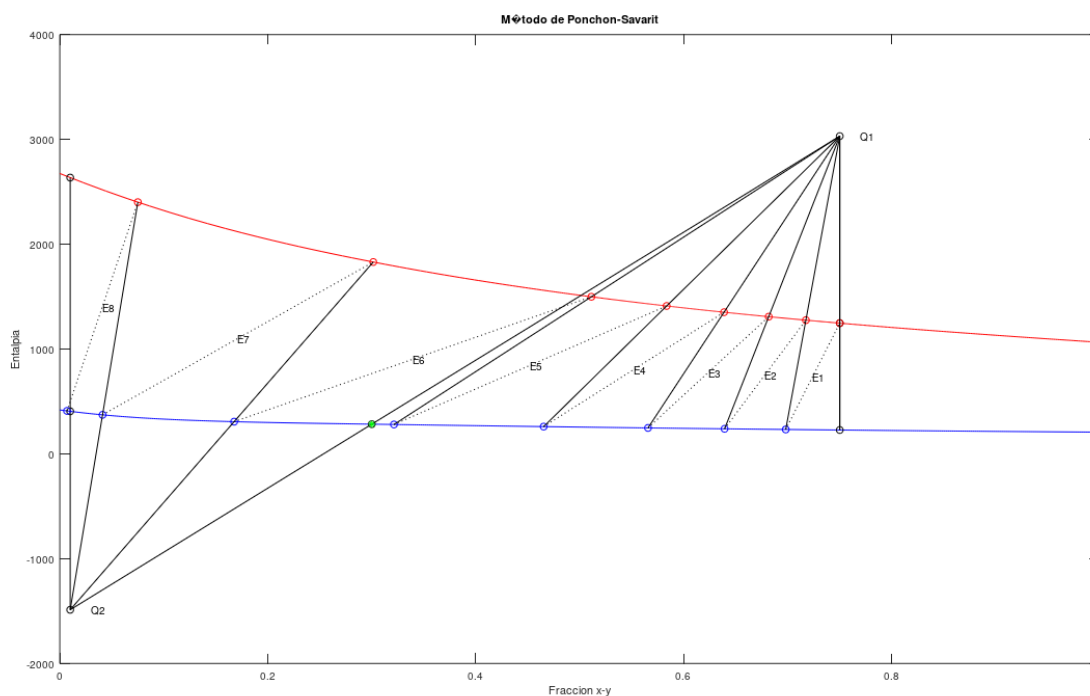


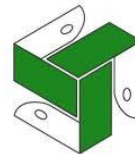
Figura 4.10 Resolución de método ponchon-savarit, etanol-agua



CONCLUSIONES

Al poner a prueba el software “enthalpy destilation” con los ejemplos de mezclas binarias benceno-tolueno y etanol-agua se obtuvieron resultados precisos y gráficamente detallados, con ellos se logró visualizar para ambas mezclas de manera exitosa las gráficas de x-y, perfil de temperaturas, método ponchon-savarit y la comparativa de las tres anteriores, y de ellas extraer el número de etapas teóricas de la torre de destilación y la etapa de alimentación etc.

Los alumnos del TESCo tendrán libre acceso al código y así poderlo implementar y complementar en sus estudios dentro de las asignaturas correspondientes y de esta manera lograr un mejor aprovechamiento de su tiempo de estancia en la carrera de ingeniería química.

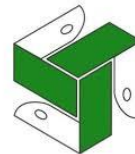


COMPETENCIAS DESARROLLADAS

- Analiza y aplica los principios de conservación de la materia y energía.
- Diseña operaciones unitarias y/o procesos para la industria química.
- Colabora en equipos interdisciplinarios y multiculturales en su ámbito laboral con espíritu crítico, actitud innovadora y disposición al cambio, cuidando su entorno ambiental.

FUENTES DE INFORMACIÓN

- Abánades, J. L. (12 de Junio de 2022). *Diquimia*. Obtenido de
http://www.diquima.upm.es/old_diquima/recursos/aspen/radfrac.html
- Abanto Valderrama, M. A. (03 de Abril de 2022 |). *Escuela Académico profesional de ingeniería química*. Obtenido de Modelado y simulación de una columna de destilación multicomponente por el método del punto de burbuja:
https://dspace.unitru.edu.pe/bitstream/handle/UNITRU/8987/AbantoValderrama_M%20-%20AvalosRuiz_J.pdf?sequence=1&isAllowed=y
- Aprea, J. L. (08 de Abril de 2022). *Pedco*. Obtenido de Plataforma de educación Comahue:
<https://pedco.uncoma.edu.ar/course/info.php?id=1684>
- Arnau, J. B. (05 de Abril de 2022). *Universitat Rovira I Virgili*. Obtenido de Modelado y simulación:
<http://deeea.urv.cat/public/PROPOSTES/pub/pdf/225pub.pdf>
- Aspentech. (12 de Junio de 2022). *Aspentech*. Obtenido de
<https://www.aspentech.com/en/resources/brochure/aspen-plus-simulacion-de-proceso-industria-quimica>
- Aula 21. (01 de Junio de 2022). *Centro de información técnica para la industria*. Obtenido de
<https://www.cursosaula21.com/que-es-la-simulacion-de-procesos-industriales/>
- Badajoz, P. S. (21 de Abril de 2022). *Accedacris*. Obtenido de
https://accedacris.ulpgc.es/bitstream/10553/8218/1/0231633_00003_0004.pdf
- Busch Vacuum. (11 de Junio de 2022). *DESTILACIÓN CON VACÍO*. Obtenido de Busch Vacuum México S. de R.L. de C.V.: <https://www.buschvacuum.com/mx/es/applications/distillation/>
- castellano, D. S. (20 de Marzo de 2022). *Univesidad de las palmas de gran canaria*. Obtenido de SIANI instituto universitario: <https://accedacris.ulpgc.es/bitstream/10553/4374/1/TFM-Desire%20Santana.pdf>
- Chemsep. (16 de Junio de 2022). *Cacheme*. Obtenido de Operaciones de separación:
<https://www.cacheme.org/chemsep-simulacion-columna-destilacion/>



Condorchem envitech. (04 de Junio de 2022). *Breve historia de las tecnologías de destilación.*

Obtenido de <https://condorchem.com/es/blog/breve-historia-de-las-tecnologias-de-destilacion/>

COOSW. (20 de Abril de 2022). *El sol de México.* Obtenido de

<https://www.elsoldemexico.com.mx/doble-via/ciencia/de-agua-del-mar-a-potable-proyecto-coosw-desarrolla-tecnologia-para-desalar-el-agua-8272275.html>

De química. (26 de Abril de 2022). *Recursos educativos de química.* Obtenido de

<https://www.dequimica.info/destilacion-simple>

Delp, N. (15 de Abril de 2022). *Scribd.* Obtenido de Ciencia y matemática:

<https://es.scribd.com/doc/225461472/Columnas-Con-Pared-Divisoria>

Fernández, G. (07 de Abril de 2022). *Industria química.net.* Obtenido de Operaciones unitarias:

<https://www.industriaquimica.net/operaciones-unitarias-en-ingenieria-quimica.html>

Flavio, V. (15 de Abril de 2022). *Scribd.* Obtenido de Tecnología e ingeniería:

<https://es.scribd.com/document/474002134/Tecnologia-de-pared-divisoria-en-columnas-de-destilacion>

Hernández, D. H. (05 de Abril de 2022). *Departamento de ingeniería Química.* Obtenido de

Universidad de los Andes:

<https://repositorio.uniandes.edu.co/bitstream/handle/1992/21779/u258476.pdf?sequence=1>

IQR. (15 de Junio de 2022). *IQR.* Obtenido de Ingeniería química reviews:

<https://www.ingenieriaquimicareviews.com/2021/07/que-es-aspen-hysys.html>

Labarta, J. A. (06 de Abril de 2022). *Docplayer.* Obtenido de Universidad de Alicante.

Lenntech. (10 de Junio de 2022). *Direct Contact Membrane Distillation.* Obtenido de

<https://www.lenntech.es/processes/Brine-Treatment/conventional-brine-treatment/md.htm#:~:text=La%20EE%80%80destilaci%C3%B3n%EE%80%81%20EE%80%80por%20membrana%EE%80%81%2028MD%20en%20ingl%C3%A9s%29%20es,los%20componentes%20de%20la%20soluci%C3%B3n%20vol%C>



Lifeder. (12 de Abril de 2022). *Destilación fraccionada: proceso, equipo, aplicaciones, ejemplos*.

Obtenido de <https://www.lifeder.com/destilacion-fraccionada/>

Liu, Y. (2021). Economic evaluation and production process simulation of biodiesel production from. *Current Research in Food Science*, 100091.

Luis Caiza, M. S. (23 de Marzo de 2022). *Colegio politecnico de la universidad san francisco de quito*. Obtenido de <https://bibdigital.epn.edu.ec/bitstream/15000/9360/1/P26.pdf>

Mathworks. (16 de Junio de 2022). *Matlab*. Obtenido de <https://la.mathworks.com/products/matlab.html>

Minaya Pinto, M. M. (10 de Abril de 2022). *Repositorio institucional*. Obtenido de Unsa: <http://repositorio.unsa.edu.pe/handle/UNSA/10845>

Misael. (15 de Octubre de 2022). *Método Ponchon-Savarit*. Obtenido de Profe misa: <https://www.youtube.com/watch?v=AnbB8Ylrn1E&t=812s>

Quimfis. (13 de Junio de 2022). *Práctica de destilación*. Obtenido de <https://www.upo.es/depa/webdex/quimfis/docencia/basesFQ/Pract/ochoinnueve.pdf>

Rodriguez, E. J. (10 de Junio de 2022). *Ingeniería química*. Obtenido de Ingenieríaquímica.net: <https://www.ingenieriaquimica.net/articulos/402-simquim-simulador-didactico-para-diseno-de-equipos-de-ingenieria-quimica>

Rueda Ferreiro, A. (07 de Abril de 2022). *Universidad de valladolid*. Obtenido de Centro de tecnología azucarera: https://www.ecosimpro.com/wp-content/uploads/2015/02/C01_04_es.pdf

Santos, N. C. (20 de Agosto de 2022). *Escuela técnica superior de ingenieros industriales universidad politectina de madrid*. Obtenido de trabajo de fin de grado para la obtencion del titulo de graduado de ingenieria quimica : https://oa.upm.es/47530/1/TFG_NUNO_CARVALHO_DOS_SANTOS.pdf

Scientec. (02 de Junio de 2022). *software científico y técnico*. Obtenido de <https://www.scientec.com.mx/chemcad/>



Steemit. (16 de Junio de 2022). *Steemit*. Obtenido de Simulación de procesos industriales:

<https://steemit.com/spanish/@benayetfranco/simulacion-de-procesos-industriales-simulador-coco-ciencia-ingenieria>

Technical courses. (06 de Junio de 2022). *Cursos técnicos*. Obtenido de Technicalcourses.net:

http://www.technicalcourses.net/portal/es/blog/blog_entrada.php?entrada_id=110

Tong, T. (19 de Abril de 2022). *Iagua*. Obtenido de [https://www.iagua.es/noticias/redaccion-](https://www.iagua.es/noticias/redaccion-iagua/nuevos-avances-tecnologia-destilacion-membrana-purificar-agua)

[iagua/nuevos-avances-tecnologia-destilacion-membrana-purificar-agua](https://www.iagua.es/noticias/redaccion-iagua/nuevos-avances-tecnologia-destilacion-membrana-purificar-agua)

Ucodemy. (19 de Junio de 2022). *Introducción a Octave*. Obtenido de

<http://www.uco.es/ucodemy/tema/1>

Universidad complutense madrid. (06 de Junio de 2022). *UCM*. Obtenido de

<https://www.ucm.es/pimcd2014-free-software/scilab#:~:text=Descripci%C3%B3n%20b%C3%A1sica%3A%20Scilab%20es%20un,aplicaciones%20de%20ingenier%C3%ADa%20y%20cient%C3%ADficas>

Universidad tecnológica de pereira. (25 de Abril de 2022). *Academia*. Obtenido de

<https://academia.utp.edu.co/quimica1/files/2016/04/Destilaci%C3%B3n-simple-y-fraccionada.pdf>

VACUDEST. (28 de septiembre de 2022). *h2o-de*. Obtenido de [https://www.cmbe.es/wp-](https://www.cmbe.es/wp-content/uploads/pdf/ES-Vacudest.pdf)

[content/uploads/pdf/ES-Vacudest.pdf](https://www.cmbe.es/wp-content/uploads/pdf/ES-Vacudest.pdf)

Wikipedia. (27 de septiembre de 2022a). Obtenido de Operacion unitaria:

https://es.m.wikipedia.org/wiki/Operaci%C3%B3n_unitaria

Wikipedia. (17 de Junio de 2022b). Obtenido de Matlab: <https://es.wikipedia.org/wiki/MATLAB>

Wikipedia. (17 de Junio de 2022c). *GNU Octave*. Obtenido de

https://es.wikipedia.org/wiki/GNU_Octave

Wordpress. (01 de Junio de 2022). *Software de simulación para la ingeniería química*. Obtenido de

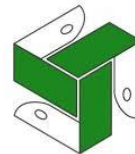
<https://rosaelenaa.wordpress.com/2013/03/06/software-de-simulacion-para-la-ingenieria-quimica/>

Wordpress b. (04 de Junio de 2022). Obtenido de

<https://unitorunozeydiio.files.wordpress.com/2011/05/chemcad.pdf>



Yeison Agudelo, R. B. (03 de Abril de 2022). *Ingeniería y desarrollo*. Obtenido de Artículo de investigación: <http://www.scielo.org.co/pdf/inde/v34n1/v34n1a10.pdf>



ANEXOS

Anexo 1 Codificación del software “enthalpy destilation”

```
clear
clc

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

f=0; xF=0.3; xD=0.75; xR=0.01;RD_Rm=2;nEmax=100;

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

GRAFICA=4;

% 1 Ponchon-Savarit
% 2 Etapas digramma x-y
% 3 Perfil de temperatura
% 4 Comparativa

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

xA_T = [0 0.02 0.05 0.1 0.2 0.3 0.4 0.5 0.6 0.7 0.8 0.9 0.94 0.96 0.98
1];

yA_T = [0 0.192 0.377 0.527 0.656 0.713 0.746 0.771 0.794 0.822 0.858
0.912 0.942 0.959 0.978 1];

T      = [100 98.1 95.2 91.8 87.3 84.7 83.2 82 81 80.1 79.1 78.3 78.2 78.1
78.2 78.3];

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

xA_H = [0 0.1 0.3 0.5 0.7 0.9 1];
yA_H = [0 0.1 0.3 0.5 0.7 0.9 1];
Hx    = [418.9 371.7 314.0 285.9 258.4 224.7 207];
Hy    = [2675 2517 2193 1870 1544 1223 1064];
PMA=46.07;
PMB=18.01528;

xA_T=(xA_T/PMA) ./ ((xA_T/PMA)+(1-xA_T)/PMB);
yA_T=(yA_T/PMA) ./ ((yA_T/PMA)+(1-yA_T)/PMB);

xA_H=(xA_H/PMA) ./ ((xA_H/PMA)+(1-xA_H)/PMB);
yA_H=(yA_H/PMA) ./ ((yA_H/PMA)+(1-yA_H)/PMB);

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

xC=linspace(0,1,500);
yC=spline(xA_T,yA_T,xC);
```



```
HxC=spline(xA_H,Hx,xC);
HyC=spline(yA_H,Hy,yC);

options = optimset('Display','off');
if f==0
    xFf=xF;
else
    xFf=fsolve(@(x,y) spline(xA_T,yA_T,x)+(1-f)./f*x-xF./f,xF,options);
end
yFf=spline(xA_T,yA_T,xFf);
Hxf=spline(xA_H,Hx,xFf);
Hyf=spline(yA_H,Hy,yFf);
HfF=(1-f)*Hxf+f*Hyf;
HxD=spline(xA_H,Hx,xD);
HyD=spline(yA_H,Hy,xD);
HxR=spline(xA_H,Hx,xR);
HyR=spline(yA_H,Hy,xR);
LEFx=[xFf yFf];
LEFy=[Hxf Hyf];
Q1m=spline(LEFx,LEFy,xD);
Q2m=spline(LEFx,LEFy,xR);

LRMx=[xR xR xR xFf yFf xD xD xD];
LRMy=[HyR HxR Q2m Hxf Hyf Q1m HyD HxD];
Rm=(Q1m-HyD)/(HyD-HxD);

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
RD=RD_Rm*Rm;
Q1=RD*(HyD-HxD)+HyD;
Q2=spline([xD xF],[Q1 HfF],xR);
L1x=[xD xD xD xF xR xR xR];
L1y=[HxD HyD Q1 HfF Q2 HxR HyR];

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
yE(1,1)=xD;
HyE=HyD;
LEQx=[xD;xD];
LEQy=[HxD;Q1];
for i=1:1:nEmax
    %Seccion de enriquecimiento
```

```
xE(1,i)=fsolve(@(x,y) spline(xA_T,yA_T,x)-yE(1,i),0,options);
HxE(1,i)=spline(xA_H,Hx,xE(1,i));
if xE(1,i)<xR
    break
end
if xE(1,i)>xF
    yE(1,i+1)=fsolve(@(y,H) spline([xE(1,i) xD],[HxE(1,i) Q1],y)-
spline(yA_H,Hy,y),xE(1,i),options);
    HyE(1,i+1)=spline(yA_H,Hy,yE(1,i+1));
    LEQx=[LEQx [xE(1,i);xD]];
    LEQy=[LEQy [HxE(1,i);Q1]];
else
    yE(1,i+1)=fsolve(@(y,H) spline([xE(1,i) xR],[HxE(1,i) Q2],y)-
spline(yA_H,Hy,y),xE(1,i),options);
    HyE(1,i+1)=spline(yA_H,Hy,yE(1,i+1));
    LEQx=[LEQx [yE(1,i+1);xR]];
    LEQy=[LEQy [HyE(1,i+1);Q2]];
end
%Seccion de agotamiento
end
No_f=i;
Enx=[xE;yE(1,1:length(xE))];
Eny=[HxE;HyE(1,1:length(HxE))];
NoEx=(xE+yE)/2;
NoEy=(HxE+HyE)/2;
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
switch GRAFICA
case 1
    plot(xC,HxC,'-b',yC,HyC,'-r',L1x,L1y,'-ok',xE,HxE,'ob',...
yE,HyE,'or',LEQx,LEQy,'-k',Enx,Eny,':k',xF,HfF,'*g')
    title('Método de Ponchon-Savarit')
    xlabel('Fraccion x-y')
    ylabel('Entalpia')
    for j=1:i
        No=j;
        text(NoEx(j),NoEy(j),strcat('E',int2str(No)))
    end
    text(xD,HxD-10000,strcat('xD = ',num2str(xD)))
```

```
text(xF,HfF-10000, strcat('xF = ', num2str(xF)))
text(xR,HxR-10000, strcat('xR = ', num2str(xR)))
text(xD+0.02,Q1, 'Q1')
text(xR+0.02,Q2, 'Q2')

case 2
    yn=Enx(2,:);
    xn=Enx(1,:);
    E_MCx=[xD];
    E_MCy=[xD];
    for i=1:1:No_f
        E_MCx=[E_MCx xn(i)];
        E_MCy=[E_MCy yn(i)];
        if i==No_f
            else
                E_MCx=[E_MCx xn(i)];
                E_MCy=[E_MCy yn(i+1)];
            end
        end
    end
    E_MCx=[E_MCx xn(i)];
    E_MCy=[E_MCy xn(i)];
    k=0;
    for j=1:2:length(E_MCx)
        k=k+1;
        LOSEx(1,k)=E_MCx(j);
        LOSEy(1,k)=E_MCy(j);
    end
    LAUX_MCx=[0 1; xD xD; xF xF; xR xR]';
    LAUX_MCy=[0 1; 0 xD; 0 xF; 0 xR]';
    XYEx=(E_MCx(1:2:length(E_MCx)-1)+E_MCx(2:2:length(E_MCx)-1))/2;
    XYEy=E_MCy(1:2:length(E_MCy));
    plot(xC,yC,E_MCx,E_MCy, '-', LAUX_MCx, LAUX_MCy)
    title('Etapas en diagrama x-y')
    xlabel('Fraccion x')
    ylabel('Fraccion y')
    for i=1:1:length(XYEx)
        text(XYEx(i),XYEy(i), strcat('E', int2str(i)))
    end
case 3
```

```
yn=Enx(2,:);
xn=Enx(1,:);
E_MCx=[xD];
E_MCy=[xD];
for i=1:1:No_f
    E_MCx=[E_MCx xn(i)];
    E_MCy=[E_MCy yn(i)];
    if i==No_f
        else
            E_MCx=[E_MCx xn(i)];
            E_MCy=[E_MCy yn(i+1)];
        end
    end
end
k=0;
for j=1:2:length(E_MCx)
    k=k+1;
    LOSEx(1,k)=E_MCx(j);
    LOSEy(1,k)=E_MCy(j);
end
XYEx=(E_MCx(1:2:length(E_MCx))+E_MCx(2:2:length(E_MCx)))/2;
XYEy=E_MCy(1:2:length(E_MCy));
for i=1:1:length(XYEx)
    text(XYEx(i),XYEy(i),strcat('E',int2str(i)))
end
E_T=spline(yA_T,T,XYEy);
plot(E_T,'-o')
title('Perfil de temperatura')
xlabel('No de etapa')
ylabel('Temperatura °C')
case 4
    subplot(2,2,1),plot(xC,HxC,'-b',yC,HyC,'-r',L1x,L1y,'-
ok',xE,HxE,'ob',...
    yE,HyE,'or',LEQx,LEQy,'-k',Enx,Eny,':k',xF,HfF,'*g')
    title('Método de Ponchon-Savarit')
    xlabel('Fraccion x-y')
    ylabel('Entalpia')
    for j=1:1:i
        No=j;
```

```
text(NoEx(j),NoEy(j),strcat('E',int2str(No)))

end

text(xD,HxD-10000,strcat('xD = ',num2str(xD)))
text(xF,HfF-10000,strcat('xF = ',num2str(xF)))
text(xR,HxR-10000,strcat('xR = ',num2str(xR)))
text(xD+0.02,Q1,'Q1')
text(xR+0.02,Q2,'Q2')

yn=Enx(2,:);
xn=Enx(1,:);
E_MCx=[xD];
E_MCy=[xD];
for i=1:1:No
    E_MCx=[E_MCx xn(i)];
    E_MCy=[E_MCy yn(i)];
    if i==No
    else
        E_MCx=[E_MCx xn(i)];
        E_MCy=[E_MCy yn(i+1)];
    end
end
k=0;
for j=1:2:length(E_MCx)
    k=k+1;
    LOSEx(1,k)=E_MCx(j);
    LOSEy(1,k)=E_MCy(j);
end
LAUX_MCx=[0 1; xD xD; xF xF; xR xR]';
LAUX_MCy=[0 1; 0 xD; 0 xF; 0 xR]';
XYEx=(E_MCx(1:2:length(E_MCx))+E_MCx(2:2:length(E_MCx)))/2;
XYEy=E_MCy(1:2:length(E_MCy));
subplot(2,2,3),plot(xC,yC,E_MCx,E_MCy,'-',LAUX_MCx,LAUX_MCy)
title('Etapas en diagrama x-y')
xlabel('Fraccion x')
ylabel('Fraccion y')
for i=1:1:length(XYEx)
    text(XYEx(i),XYEy(i),strcat('E',int2str(i)))
end
E_T=spline(yA_T,T,XYEy);
```



```
subplot(1,2,2),plot(E_T,'-o')  
title('Perfil de temperatura')  
xlabel('No de etapa')  
ylabel('Temperatura °C')  
otherwise  
end
```