

870118

UNIVERSIDAD AUTONOMA DE GUADALAJARA
INCORPORADA A LA UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS QUIMICAS



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

PREDICCIÓN, POR COMPUTADORA, DE DATOS DE EQUILIBRIO
LIQUIDO-VAPOR PARA MEZCLAS BINARIAS, UTILIZANDO EL
METODO ASOG PARA EL CALCULO DE LOS
COEFICIENTES DE ACTIVIDAD.

TESIS PROFESIONAL
PARA OBTENER EL TITULO DE
INGENIERO QUIMICO
P R E S E N T A
CARLOS MANUEL URZUA HERNANDEZ
ASESOR: I.Q. ZEFERINO I. RAMIREZ B.
GUADALAJARA, JAL. AGOSTO DE 1990



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Í N D I C E

Nomenclaturas:	I
Introducción:	III
Capítulo I: Fundamentos termodinámicos para la obtención de los datos de equilibrio líquido vapor:	1
Capítulo II: Descripción del método ASOG:	6
Capítulo III: Algoritmo de solución:	9
Capítulo IV: Diagramas de flujo del programa:	12
Capítulo V:	15
A).- Codificación del programa en lenguaje Basic.	
B).- Corrida de prueba para el programa.	
Capítulo VI: Resultados:	21
- Bloque A.	
- Bloque B.	
Capítulo VII: Aplicación de los resultados obtenidos:	55
Capítulo VIII: Discusión de resultados:	75
Resumen:	77
Conclusiones:	79
Apéndices:	81
Bibliografía:	86

Nomenclatura

N O M E N C L A T U R A

- A_{k1}** : Parámetro de Wilson para los grupos k e i .
- F** : Fugacidad de un componente puro.
- F̄** : Fugacidad de un componente en una mezcla.
- (F/P)** : Coeficiente de Fugacidad.
- G** : Energía libre de Gibbs.
- G^{IG}** : Energía libre de Gibbs en estado de Gas Ideal.
- Ḡ^I(i)** : Energía libre de Gibbs molar parcial en la fase I.
- Ḡ^{II}(i)** : Energía libre de Gibbs molar parcial en la fase II.
- γ_i** : Coeficiente de actividad de un componente puro.
- γ_i^{FH}** : Contribución de tamaño al coeficiente de actividad total.
- γ_i^G** : Contribución de la interacción de los grupos funcionales la coeficiente de actividad total.
- P_i^{VAP}** : Presión de vapor del componente (i).
- P_{tot}** : Presión total del sistema.
- R** : Constante de los gases.
- R_i** : Proporción de los grupos del componente (i) con respecto del total de los grupos existentes en la mezcla.
- T** : Temperatura del sistema.
- Γ** : Coeficiente de actividad de grupo en disolución.
- Γ*** : Coeficiente de actividad de Grupo en estado estándar.
- V** : volumen de un compuesto.

V^{IG} : Volúmen en estado de Gas Ideal.

$v(i, j)$: Número de grupos funcionales del tipo (i) presentes en la molécula (j).

X_d : Concentración de destilado.

X_w : Concentración de residuo/.

x_i : Fracción molar del componente (i) en fase Líquida.

X_k : Fracción molar de grupo.

y_i : Fracción molar del componente (i) en fase vapor.

Introducción

INTRODUCCIÓN

En la actualidad, la industria química en general ha contemplado el descubrimiento de una infinidad de compuestos nuevos que permiten vislumbrar un horizonte amplio para el desarrollo de nuevas aplicaciones de los mismos dentro de esta industria.

Sin embargo, debido precisamente a la complejidad de los compuestos y a la carencia de información suficiente respecto de sus características y propiedades, y de la misma forma a la poca disponibilidad de los datos publicados, el estudio del comportamiento en la industria e incluso a nivel laboratorio se hace difícil.

Dentro de los casos mencionados anteriormente se encuentran las situaciones en las cuales se requieren datos de equilibrio líquido-vapor para el diseño de torres de destilación, torres de absorción, etc.. En ambas situaciones, se requiere contar con datos de equilibrio líquido-vapor para un sistema dado que permita el cálculo de ingeniería. La alternativa experimental surge entonces como el único recurso disponible para proporcionar la información; sin embargo, este proceso es lento y costoso, lo cual representa un problema ya que en la mayoría de los casos, el dinero y el tiempo son recursos que se encuentran limitados.

Ante esta situación, las investigaciones se han enfocado a la búsqueda de métodos matemáticos que permitan la obtención de parámetros que antes sólo podían obtenerse experimentalmente. De ahí surge la teoría de grupos, que proporciona varias formas que permiten realizar los cálculos.

El presente trabajo tiene por objetivo el probar la eficiencia del método ASOG para la obtención de coeficientes de actividad, los cuales a su vez se utilizarán para calcular los valores de equilibrio líquido-vapor.

No obstante, como todo método matemático se encontrarán algunas limitaciones en cuanto a capacidad de proceso y a condiciones de operación.

Es importante señalar que el método proporciona una alternativa interesante, pues sus resultados pueden aplicarse directamente para diseño preliminar de equipos que asimismo permite el costeo de los mismos, de tal suerte que se pueda tener un panorama completo de una operación determinada en la mesa de trabajo.

Capitulo I

FUNDAMENTOS TERMODINÁMICOS PARA LA OBTENCIÓN DE LOS DATOS DE EQUILIBRIO LÍQUIDO-VAPOR.

Se entiende por equilibrio aquel estado en que las condiciones generales de un sistema se mantienen constantes al paso del tiempo.

En termodinámica, todo cálculo de equilibrio se realiza utilizando un criterio basado en alguna función específica como energía libre, entalpía, entropía, fugacidad, etc.. Sin embargo, dependiendo de las condiciones del sistema que se estudie es el criterio y la función termodinámica que se utiliza, ya que se pueden adquirir ciertas ventajas con la elección.

Para el caso del equilibrio líquido-vapor, todos los cálculos se realizan utilizando el criterio de fugacidad, debido a la relación que tiene con la función de energía libre de Gibbs, misma que facilita el cálculo de equilibrio de fases dado que el criterio utilizado para este punto es el que establece la identidad de energía libre $\bar{G}^I(i) = \bar{G}^II(i)$ para toda especie (i) a temperatura y presión constantes e iguales en ambas fases.

La fugacidad es una función termodinámica que tiene unidades de presión, designada por (F) y se define como sigue:

$$F = P \exp \left[\frac{\bar{G}(T,P) - \bar{G}^{IG}(T,P)}{RT} \right] = P \exp \left[\int_0^P \left(\frac{1}{v} - \frac{1}{v^{IG}} \right) dP/RT \right] \quad I.1$$

Como se puede observar, la fugacidad se hace igual a la presión a presiones suficientemente bajas como para que el compuesto se acerque al estado de gas ideal.

Se tiene un estado de equilibrio líquido-vapor para un compuesto dado cuando la fugacidad en disolución de un componente (i) en la fase líquida es igual a la fugacidad del mismo componente en la fase vapor, siendo la presión y la temperatura constantes e iguales para cada una de las fases correspondientes; esto se indica mediante la ecuación siguiente:

$$\bar{f}_i^l(T, P, x) = \bar{f}_i^v(T, P, y) \quad 1.2$$

El punto de vista con que se maneja la situación de equilibrio líquido-vapor es aquél que establece que en la fase líquida se encuentran mezclados los componentes distintos formando así un medio homogéneo, y de la misma forma en la fase de vapor.

Para estimar la fugacidad de una especie en una mezcla líquida simple se tiene la expresión:

$$\bar{f}_i^l(T, P, x) = x_i \gamma_i^L(T, P, x) \bar{f}_i^l(T, P) \quad 1.3$$

y para una mezcla de gas:

$$F_i^V(T, P, y) = y_i \gamma_i^V(T, P, x) F_i^V(T, P) \quad 1.4$$

Para el caso de la fase líquida, el coeficiente de actividad puede obtenerse a partir de datos experimentales, la teoría de la solución regular o bien la teoría de los estados correspondientes. En la fase de vapor los coeficientes de actividad pueden incluirse y estimarse a partir de las ecuaciones viriales, de otras ecuaciones de estado o también con la teoría de los estados correspondientes.

Por lo tanto, utilizando las expresiones anteriores (1.3 y 1.4) en la ecuación de equilibrio líquido-vapor (1.2), y considerando que el valor de γ_i^V es la unidad dadas las condiciones del sistema se obtiene:

$$x_i \gamma_i^L(T, P, x) F_i^L(T, P) = y_i F_i^V(T, P) \quad 1.5$$

En la expresión anterior, x_i es un dato que se asignará arbitrariamente y γ_i^L se calculará a partir de dicho valor utilizando el método AROG. Sin embargo, para estimar el valor de y_i correspondiente, es necesario calcular los valores para la fugacidad de componente puro en fase vapor y en fase líquida.

Para el caso de F_i^L se tiene la expresión:

$$F_i^L(T,P) = P_i^{\text{vap}}(T) (F/P)_{\text{sat}} \exp\left(\int_{P_i}^P v_i/RT \, dP\right) \quad 1.6$$

en la cuál el término exponencial se denomina factor de corrección de Poynting. Si se asume que la presión del sistema es baja entonces la corrección de Poynting tiende a ser despreciable pues su valor tiende a la unidad, con lo cuál la ecuación 1.6 resulta:

$$F_i^L(T,P) = P_i^{\text{vap}}(T) (F/P)_{\text{sat}} \quad 1.7$$

Manteniendo el mismo criterio de presiones bajas, entonces el valor del coeficiente de fugacidad tiende a la unidad resultando entonces la ecuación 1.7 en

$$F_i^L(T,P) = P_i^{\text{vap}}(T) \quad 1.8$$

Al incorporar lo anterior en el lado izquierdo de la ecuación 1.5 resulta

$$x_i^L(T,P,x) P_i^{\text{vap}}(T) = y_i^V F_i^V(T,P) \quad 1.9$$

Para calcular el valor de F_i^V se tiene la expresión:

$$F_i^V = (F/P)_{\text{tot}} P \quad 1.10$$

Sin embargo, dado el criterio de considerar la presión baja para el sistema en cuestión entonces el coeficiente de fugacidad tiende a la unidad, con lo cual la expresión anterior resulta:

$$f_i^v = P_i / P_{tot} \quad \text{I.11}$$

o incluyéndola en la ecuación I.9

$$\gamma_i^L(T, P, x_i) P_i^{vap}(T) = y_i P_{tot} \quad \text{I.12}$$

resolviendo para y_i :

$$y_i = x_i \gamma_i^L(T, P, x_i) P_i^{vap}(T) / P_{tot} \quad \text{I.13}$$

La expresión anterior se incluirá en el algoritmo que se describe en un capítulo posterior, con el fin de estimar un valor de y_i a partir de γ_i^L obtenido éste por el método ASOG, y mediante la comparación de dicho valor de y_i con el obtenido por métodos experimentales (reportados en la literatura) para el mismo sistema y en condiciones similares, se determinará el grado de exactitud que el modelo que se prueba puede proporcionar.

Capitulo II

DESCRIPCIÓN DEL MÉTODO ASOG

Conceptualmente el método ASOG (Analytical Solutions Of Groups) tiene como fundamento la solución de grupos formulada por Wilson y Deal por lo cual se presentan muchos elementos comunes, particularmente en los primeros pasos.

El coeficiente de actividad de un componente (i) en disolución se establece como la suma de dos términos:

$$\text{Log } \gamma_i = \text{Log } \gamma_i^{\text{FH}} + \text{Log } \gamma_i^{\text{G}} \quad 11.1$$

, siendo $\text{Log } \gamma_i^{\text{FH}}$ una contribución de tamaño y $\text{Log } \gamma_i^{\text{G}}$ un término asociado con la interacción de los grupos funcionales de la molécula en relación con las moléculas de los alrededores.

El término de tamaño se trata de acuerdo con la expresión de Flory-Huggins:

$$\text{Log } \gamma_i^{\text{FH}} = \text{Log } R_i + 0.474 (1 - R_i) \quad 11.2$$

siendo R_i la proporción de los grupos del compuesto (i) con respecto del total de grupos existentes en la mezcla:

$$P = \frac{FH}{\sum_{i=1}^n \frac{v_i}{v_i} y_i}$$

11.3

en la ecuación anterior, v_i es el número de grupos funcionales distintos presentes en cada molécula (j).

Por otra parte, la contribución al coeficiente de actividad de la interacción de los grupos funcionales resulta de relacionar los valores de los coeficientes de actividad de grupo en solución (Γ) y en estado estándar (Γ^* ; referido al valor para una solución al 100 % de concentración para cada uno de los componentes).

$$\ln \gamma_i^G = \sum_{k=1}^n \frac{v_{ki}}{v_i} (\log \Gamma_k - \log \Gamma_k^*) \quad 11.5$$

siendo v_{ki} el número de grupos de tipo (k) presentes en la molécula de soluto, y Γ es una función de la composición tanto en la solución como en el estado estándar (*). Se supone además que el valor de Γ es constante para toda mezcla que tenga la misma composición de grupos. Este último término puede interpretarse también como los coeficientes de actividad con respecto a un estado hipotético consistente de tan sólo grupos puros.

En su forma original, el método de solución de grupos requería de toda una base de datos para poder determinar la

dependencia de Γ con las fracciones de grupo y en la práctica se encontraba restringida a los sistemas con un máximo de dos grupos distintos. Sin embargo, para suprimir estas limitaciones se utiliza un método analítico que no necesita de toda la base de datos y que además permite trabajar con sistemas de multicomponentes y que asimismo contengan muchos grupos funcionales distintos.

La selección de esta ecuación se realizó en base a la experiencia obtenida con muchos sistemas, y la opción mejor fue la ecuación de Wilson:

$$\text{Log } \Gamma_k = - \text{Log} \sum_{i=1}^n \frac{y_i A_{ik}}{i} + 0.434 \left[1 - \frac{\sum_{i=1}^n \frac{X_i A_{ik}}{\sum_{m=1}^n X_m A_{im}}}{\sum_{m=1}^n X_m A_{im}} \right] \quad \text{II.6}$$

donde A son los parámetros de Wilson para los grupos (k e i). De igual forma, la fracción molar de grupo (k) se define como la proporción del número total de grupos k derivados de todas las especies con respecto del número total de grupos de todas las clases presentes en la mezcla:

$$x_k = \frac{\sum_{i=1}^n X_i v_{ki}}{\sum_j X_j \sum_k v_{kj}} \quad \text{II.7}$$

con la misma ecuación se obtienen los parámetros de estado estándar, utilizando primero $X_i=1$ y luego $X_i=0$ después de lo cual se interrelacionan ambos de acuerdo con la ecuación II.5.

Finalmente, se obtiene el valor para el coeficiente de actividad global al relacionar las ecuaciones II.2 y II.5 en la ecuación II.1.

Capitulo III

ALGORITMO DE SOLUCIÓN

El algoritmo de solución utilizado para la realización del programa se fundamenta básicamente en el método ASOG presentado en el capítulo anterior, y a continuación se detalla cada uno de los pasos de dicho algoritmo:

1.- Selección del sistema binario a estudiar.

1.1.- Determinación del número de grupos funcionales de cada uno de los componentes de la mezcla.

1.2.- Comparación entre los grupos funcionales de la mezcla y determinación de los grupos distintos entre sí.

2.- Observación de los parámetros del método.

2.1.- Por simple observación se determina la interacción del grupo (I) en la molécula (J).

2.2.- Con ayuda de tablas (véase tabla del apéndice) se determina la interacción del grupo (I)-con el grupo (J), $A(I,J)$.

3.- Alimentación al programa de los valores obtenidos en los puntos anteriores, además de las condiciones de operación como temperatura del sistema, y presión de vapor de los componentes.

Con esta información se inician los bloques de cálculo matemático del programa:

4.- Cálculo de la proporción de grupos del soluto en el total de grupos en la molécula de líquido, según la ecuación II.3.

5.- Con el valor anterior se obtiene la contribución de tamaño al coeficiente de actividad con la ecuación II.2.

6.- La fracción molar de grupo se obtiene con la ecuación II.7.

El programa tiene capacidad de realizar el cálculo para cualquier cantidad de grupos presentes en la mezcla, y lo realiza primero calculando las parejas (X_i, v_{ik}); después los suma obteniendo el denominador de la fórmula, y finalmente obtiene el valor correspondiente para la fracción de cada grupo distinto de la mezcla.

7.- Cálculo de los coeficientes de actividad de grupo mediante la ecuación II.6. Para realizar esta operación la ecuación se fracciona como sigue:

- Primero se obtienen los pares (X_i, A_{ik}) correspondientes a la sumatoria del denominador del segundo miembro de la ecuación. Enseguida, con los resultados anteriores se determinan los denominadores de todos los términos de la sumatoria.

8.- Utilizando la misma ecuación II.6 y el procedimiento descrito anteriormente, se obtienen los valores para el coeficiente de actividad de estado estándar, utilizando los valores correspondientes de $X_i=1$ y $X_i=0$,

respectivamente. En este caso el programa utiliza una subrutina y termina el cálculo por su cuenta.

9.- Con los valores obtenidos en los puntos 7 y 8 del presente algoritmo, se calcula la contribución al coeficiente de actividad por parte de la interacción de grupo, con la ecuación II.5.

10.- Finalmente se obtiene el valor para el coeficiente de actividad global con la suma de la contribución de tamaño y la contribución de grupos con la ecuación II.1.

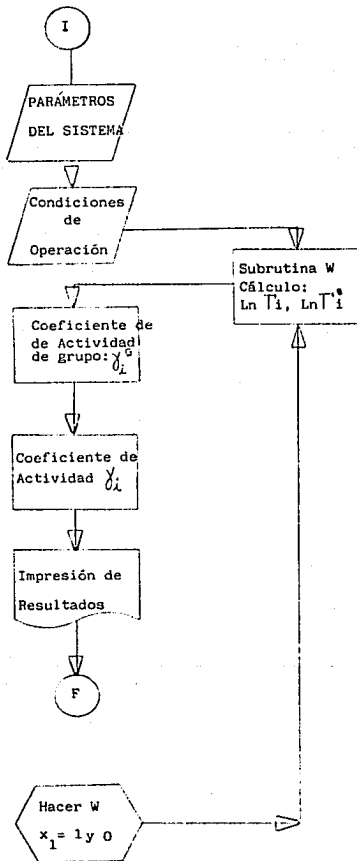
11.- Para la determinación del valor de la fracción de vapor a las condiciones dadas se toma la igualdad indicada por la ecuación I.13.

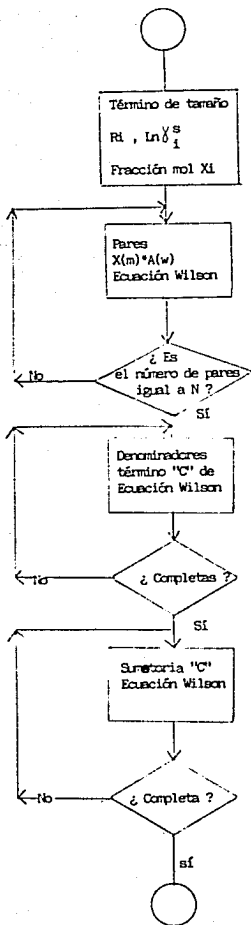
12.- Los datos obtenidos se imprimen en una hoja de trabajo, que se presenta posteriormente.

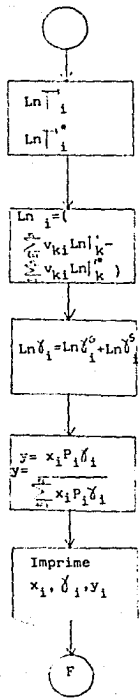
Capitulo IV

DIAGRAMAS DE FLUJO DEL PROGRAMA

12







$$\begin{matrix} \ln | i \\ \ln | i \end{matrix}$$

$$\ln i = \left(\sum_{k=1}^n v_{ki} \ln |k|^{-} - \sum_{k=1}^n v_{ki} \ln |k| \right)$$

$$\ln \delta_i = \ln \gamma_i^o + \ln \delta_i^s$$

$$y = \frac{x_i P_i \delta_i}{\sum_{i=1}^n x_i P_i \delta_i}$$

Imprime
x_i, δ_i, y_i

F

Capitulo V

A).- CODIFICACIÓN DEL PROGRAMA EN LENGUAJE BASIC.

LIST 10-330

```

10 REM PROGRAMA DE TESTS
12 HTAB 3: VTAB 4
13 REM BLOQUE DE ALIMENTACION DE DATOS GENERALES. CUANDO LA COMPUTADORA LO SOLICITE,
  INSERTE LOS DATOS REQUERIDOS PARA LOS GRUPOS FUNCIONALES, LA INTERACCION DE GRUPO
  EN LAS DISTINTAS MOLECULAS Y LOS PARAMETROS DE INTERACCION DE GRUPO.
20 HTAB 3: VTAB 3: PRINT "COMPUESTOS PRESENTES EN LA MEZCLA:"
22 HTAB 3: VTAB 4: INPUT "1" "I1"
23 HTAB 3: VTAB 7: INPUT "2" "I2"
25 A% = "GRUPOS DE LA MOLECULA 1"
33 HTAB 1: VTAB 9: PRINT AX%
40 HTAB 24: VTAB 9: INPUT " " "I3"
43 AX% = "GRUPOS DE LA MOLECULA 2"
48 HTAB 1: VTAB 10: PRINT AX%
50 HTAB 24: VTAB 10: INPUT " " "I2"
60 INPUT "GRUPOS DIFERENTES EN LA MEZCLA:" "IN
70 E = 1
73 DIM B(50): DIM C(50): DIM Q(50): DIM V(50)
74 DIM H(50): DIM X(50): DIM A(50): DIM O(50)
77 DIM T(50): DIM L(50): DIM Y(50)
80 FOR I = 1 TO H
90 FOR J = 1 TO T
98 XC = 12 + E
100 HTAB 1: VTAB XC: PRINT "INTERACCION GRUPO(1) EN LA MOLECULA(1) J": HTAB
38: VTAB XC: INPUT " " "V(E)"
110 E = E + 1
120 NEXT J
130 NEXT I
140 P = 1
150 FOR Q = 1 TO H
160 FOR R = 1 TO H
165 XC = (14 + 2 * (IN)) + P
170 PRINT "INTERACCION GRUPO (1) CON GRUPO (1) R": INPUT " " "A(P)"
180 P = P + 1
190 NEXT R
200 NEXT Q
205 HOME
204 HTAB 3: VTAB 3: PRINT "CONDICIONES DE OPERACION"
207 HTAB 3: VTAB 4: INPUT "TEMPERATURA=" "T"
208 HTAB 3: VTAB 9: INPUT "PRESION DE VAPOR 1=" "P1"
209 HTAB 3: VTAB 12: INPUT "PRESION DE VAPOR 2=" "P2"
210 HOME
211 FOR XK = 1 TO 10: XI = XK * .1
220 D = 1
225 A = 1: AG = 1
240 GOTO 1240
280 X2 = 1 - X1
290 B = (S1 * X1) + (S2 * X2)
300 B(A) = (1 - (S1 / B1)) + LOG (S1 / B)
310 C(D) = (1 - (S2 / B1)) + LOG (S2 / B)
320 E = 1
325 K = 1
330 FOR E = 1 TO (IN) - 2
340 O = V(E) * X1
350 E = E + 1

```

3LIST 350-700

```
350 E = E + 1
360 G = G + (V1E) * X2)
370 H(K) = G
380 F = K + 1
390 NEXT E
400 L = 0
410 FOR K = 1 TO N
420 L = L + H(K)
430 NEXT K
440 K = 0
450 FOR M = 1 TO N
460 K = K + 1
470 X(H) = H(K) / L
480 NEXT M
490 M = 1
500 V4 = 1
510 V3 = N
515 V5 = 0
516 V6 = 0
520 FOR P = 1 TO N
530 FOR W = V4 TO V3
540 D4 = (X(W) * A(W))
550 Y(W) = D4
560 V4 = V4 + 1
570 NEXT W
580 M = M + 1
590 V5 = V5 + 1
600 V3 = N + (V5 + 1)
605 V4 = V4 + 1
610 NEXT P
611 T6 = N
612 P = 1
613 A = 1
614 XN = 0
620 FOR Z = 1 TO N
630 R = 1
640 X5 = 0
650 FOR P = A TO T6
660 X5 = X5 + (X(M) * A(P))
670 R = R + 1
680 NEXT P
690 L1(Z) = X5
700 XN = XN + 1
```

```

ILIST 700-1)00

700 XN = XN + 1
705 A = (M $ XN) + 1
710 Td = M $ XN + 1)
720 NEXT 2
730 U = 1
735 XC = 1
740 FOR F = 1 TO M
750 X6 = D
760 FOR Z = 1 TO M
770 Xd = Xd + (YU) / L(2)
780 U = U + N
790 NEXT Z
795 XC = XC + 1
800 DIF1 = Xd
810 U = XC
820 NEXT F
830 F = 1
840 Z = 1
850 FOR AL = 1 TO M
860 Q(AB) = 12 - DIF1 - 100 (L(2))
876 HONE
880 F = F + 1
890 Z = Z + 1
895 AB = AB + 1
900 NEXT A1
910 A = A + 1
915 D = D + 1
916 RETURN
917 AB = 1
950 E = 1
960 FOR U2 = 1 TO 2
970 AB = 1
980 T(U2) = D
990 FOR G2 = 1 TO N
1000 T(U2) = T(U2) + (V(K) $ Q(AB))
1010 E = E + 2
1020 AB = AB + 1
1030 NEXT G2
1040 E = 2
1050 NEXT U2
1060 E = 1
1065 AB = N + 1
1070 FOR U2 = 1 TO 2
1080 FOR G2 = 1 TO N
1100 T(U2) = T(U2) - (V(K) $ B(AB))

```

LIST 1100-

```

1100 T(U2) = T(U2) - (VIE) * Q(AB1)
1110 E = E + Z
1120 AB = AB * I
1130 NEXT Q2
1150 E = Z
1155 AB = (Z * M) + I
1160 NEXT U2
1170 UZ = I
1180 A = I
1185 D = I
1190 A3 = EXP (T(U2) * B(A))
1200 UZ = UZ + I
1210 A4 = EXP (T(U2) * C(D))
1211 C1 = XK * .1
1215 IN = (X1 * A3 * PS) + ((1 - X1) * A4 * PR2)
1217 YE = (X1 * A3 * PS) / IN
1220 HTAB 3: VTAB 2 + XK: PRINT *X=[XK / 10: HTAB 10: VTAB 2 + XK: PRINT A3: H
TAB 2]: VTAB 2 + XK: PRINT YE
1235 NEXT XK
1240 END
1240 GOSUB 280: X1 = 1: GOSUB 280: X1 = 0: GOSUB 280
1270 GOTO 950

```

3

B).- CORRIDA DE TRABAJO

A continuación se detallan los pasos a seguir para realizar una corrida de trabajo para probar el programa antes de su operación.

Sistema elegido: Etanol-Agua

Molécula 1 = Etanol

Molécula 2 = Agua (Selección arbitraria)

Grupos en la molécula 1 = 3 (CH₃, CH₂, y OH)

Grupos en la molécula 2 = 2 (H y OH)

Grupos distintos en la mezcla = 2 (OH y CH₃)

(CH₃ se considera como igual a CH₂; el hidrógeno es despreciable).

Interacción de grupos en las moléculas del sistema

Int. CH₃ en molécula de Etanol = 2 (Hay dos grupos)

Int. CH₃ en molécula de Agua = 0 (No existe este grupo)

Int. OH en molécula de Etanol = 1

Int. OH en molécula de Agua = 1

Interacción de grupos funcionales

Interacción CH₃ con CH₃ = 1

Interacción CH₃ con OH = 0.305

Interacción OH con CH₂ = 0.0147

Interacción OH con OH = 1

Condiciones de Operación

Temperatura = 50 grados centígrados

Presión de vapor etanol a 50 C = 221.207 mm Hg

Presión de vapor agua a 50 C = 92.229 mm Hg

El programa entonces inicia su proceso de cálculo y como salida se deben obtener los siguientes valores:

X	Coef. de A.	Y
0.1	3.6737502	0.479776
0.2	2.0571141	0.512515
0.3	1.5173255	0.546190
0.4	1.2740624	0.588933
0.5	1.1471654	0.639957
0.6	1.0761893	0.698346
0.7	1.0357689	0.763602
0.8	1.0135759	0.835555
0.9	1.0029494	0.914274
1.0	1.0000000	1.000000

Cabe hacer notar que el programa puede modificarse ligeramente a fin de que sea capaz de proporcionar los valores para un sistema cualquiera, cuando las condiciones de temperatura no sean constantes para todo el conjunto de composiciones en fase líquida. Este es el caso que se presentó al establecer la comparación entre los valores de la literatura, y asimismo también puede modificarse para obtener los resultados para trabajar con distintas composiciones de aquellas que el programa utiliza y que son las que se observaron en la lista de resultados anteriores.

Capitulo VI

R E S U L T A D O S

En este capítulo se incluyen los resultados obtenidos al realizar las corridas de trabajo con el programa para diferentes sistemas.

Fue necesario, sin embargo, que los datos que proporcionarían estas corridas fueran lo suficientemente válidos como para permitir el establecer conclusiones respecto de la efectividad del método ASOG para el cálculo de coeficientes de actividad, que a su vez sirven para obtener los datos de equilibrio líquido vapor de un sistema binario. Dichos resultados, después de ser analizados, deben definir la efectividad y versatilidad del método, a fin de poder establecer los alcances reales del presente trabajo.

Por lo tanto los resultados se presentan en la forma de dos bloques distintos:

Bloque A).- Localizando en diversas fuentes bibliográficas fueron ubicadas tablas de valores de equilibrio líquido-vapor obtenidas experimentalmente, para distintos sistemas en diversas condiciones. Con esta información a mano, se intentó duplicar en computadora las condiciones a las cuales fueron obtenidas dichas tablas y con el programa se obtuvieron los valores correspondientes para cada caso. Se realizó una comparación entre ambos resultados y se presentan en forma conjunta y se inicia con ello la obtención de conclusiones.

Bloque B).- El programa se utiliza para obtener datos de equilibrio Líquido-Vapor para varios sistemas, definidos estos arbitrariamente. con esto se pretende demostrar la versatilidad que el método tiene para trabajar con sistemas de características químicas distintas. Para ello se utilizaron varias temperaturas para cada sistema, de tal forma que pudiera observarse si el efecto temperatura influye de alguna manera sobre los resultados que proporciona el programa.

TABLA VI-1

SISTEMA: ACRILONITRILLO-AGUA

GRUPOS MOLECULA ACRILONITRILLO= 3

GRUPOS MOLECULA DE AGUA= 2

GRUPOS DISTINTOS EN LA MEZCLA= 4

PARAMETROS DE GRUPO

V(1,1)=1	V(2,1)=1	V(3,1)=1	V(4,1)=0
V(1,2)=0	V(2,2)=0	V(3,2)=0	V(4,2)=1
A(1,1)=1.000	A(2,1)=1.170	A(3,1)=0.047	A(4,1)=0.215
A(1,2)=0.025	A(2,2)=1.000	A(3,2)=0.385	A(4,2)=0.025
A(1,3)=0.445	A(2,3)=0.033	A(3,3)=1.000	A(4,3)=0.549
A(1,4)=0.315	A(2,4)=0.680	A(3,4)=0.291	A(4,4)=1.000

RESULTADOS

TEMPERATURA=25 C

TEMPERATURA=40 C

X	Y(EXP)	Y(ASOG)	X	Y(EXP)	Y(ASOG)
0.0012	0.199	0.1951	0.0013	0.176	0.1780
0.0026	0.310	0.3031	0.0025	0.285	0.2891
0.0051	0.401	0.4032	0.0049	0.422	0.4321
0.0084	0.570	0.4085	0.0113	0.592	0.6086
0.0164	0.510	0.5388	0.0172	0.603	0.6804
0.0307	0.575	0.6077	0.0224	0.709	0.7172
0.0488	0.653	0.6447	0.0241	0.722	0.7261
0.0702	0.835	0.6840	0.0253	0.751	0.7261
0.0954	0.713	0.7042	0.0273	0.720	0.7402
0.1171	0.732	0.7204			
0.1483	0.754	0.7392			
0.1801	0.762	0.7411			
0.2007	0.760	0.7448			
0.2214	0.763	0.7488			
0.2275	0.777	0.7586			
0.2244	0.777	0.7637			
0.2251	0.786	0.7667			
0.2258	0.788	0.7675			

TABLA VI-2
SISTEMA: ETANOL-AGUA

GRUPOS MOLECULA ETANOL= 3
GRUPOS MOLECULA DE AGUA= 2

GRUPOS DISTINTOS EN LA MEZCLA= 2

PARÁMETROS DE GRUPO

V(1,1)=2 V(1,2)=0 V(2,1)=1 V(2,2)=1
A(1,1)=1.000 A(1,2)=0.305 A(2,1)=0.0147 A(2,2)=1.000

RESULTADOS

TEMPERATURA=50 C

X	Y (EXP)	Y (ASOG)
0.0000	0.4754	0.4750
0.1600	0.5034	0.5010
0.2500	0.5147	0.5132
0.3766	0.5204	0.5180
0.4870	0.5207	0.5207
0.7455	0.7359	0.7355

TEMPERATURA=60.6 C

X	Y (EXP)	Y (ASOG)
0.0510	0.316	0.4298
0.0560	0.375	0.4600
0.1770	0.517	0.5076
0.2750	0.596	0.5735
0.3450	0.648	0.6412
0.5270	0.660	0.6514
0.5450	0.671	0.6610
0.6030	0.826	0.8375
0.7510	0.862	0.8771
0.8800	0.867	0.8800
0.9720	0.972	0.9750

TEMPERATURA=75 C

X	Y (EXP)	Y (ASOG)
0.7701	0.7700	0.7701
0.7924	0.6920	0.7024
0.5250	0.5170	0.5250
0.0106	0.6000	0.6106
0.6922	0.7010	0.6922
0.8797	0.8650	0.8797

TABLA VI-3
 SISTEMA: AGUA-2-BUTANOL

GRUPOS MOLECULA '2-BUTANOL= 5
 GRUPOS MOLECULA DE AGUA= 2

GRUPOS DISTINTOS EN LA MEZCLA= 2

PARAMETROS DE GRUPO

$V(1,1)=1$ $V(1,2)=1$ $V(2,1)=1$ $V(2,2)=0$
 $A(1,1)=1.000$ $A(1,2)=1.17$ $A(2,1)=0.047$ $A(2,2)=0.215$

RESULTADOS

TEMPERATURA=60 C

TEMPERATURA=80 C

Y	Y (EXP)	Y (ASOG)	X	Y (EXP)	Y (ASOG)
0.017	0.255	0.6348	0.013	0.273	0.6517
0.027	0.345	0.6179	0.027	0.352	0.6370
0.039	0.360	0.5784	0.043	0.372	0.3020
0.026	0.360	0.2840	0.389	0.376	0.3131
0.043	0.362	0.2837	0.447	0.381	0.3343
0.069	0.369	0.2923	0.510	0.405	0.3630
0.737	0.370	0.2776	0.589	0.432	0.4100
0.447	0.736	0.3182	0.693	0.484	0.4940
0.513	0.772	0.3462	0.786	0.578	0.5964
0.539	0.423	0.3931	0.647	0.702	0.6815
0.573	0.478	0.4765	1.000	1.000	1.0000
0.736	0.551	0.5786			
0.847	0.655	0.6653			
1.000	1.000	1.0000			

TARLA VI-4
 SISTEMA: ACETONA-AGUA

GRUPOS MOLECULA ACETONA= 3
 GRUPOS MOLECULA DE AGUA= 2

GRUPOS DISTINTOS EN LA MEZCLA= 3

PARÁMETROS DE GRUPO

V(1,1)=2	V(2,1)=1	V(3,1)=0
V(1,2)=0	V(2,2)=0	V(3,2)=1
A(1,1)=1.000	A(2,1)=0.0500	A(3,1)=0.0147
A(1,2)=1.333	A(2,2)=1.0000	A(3,2)=0.6680
A(1,3)=0.305	A(2,3)=0.0400	A(3,3)=1.0000

RESULTADOS

TEMPERATURA=25 C

TEMPERATURA=30 C

X	Y (EXP)	Y (ASOG)	X	Y (EXP)	Y (ASOG)
0.000	0.000	0.0000	0.000	0.500	0.6609
0.072	0.740	0.2400	0.072	0.730	0.6695
0.117	0.808	0.2722	0.117	0.817	0.6620
0.171	0.859	0.3047	0.171	0.825	0.6540
0.234	0.889	0.3375	0.234	0.862	0.6470
0.310	0.904	0.3507	0.310	0.844	0.6485
0.409	0.877	0.3643	0.400	0.876	0.6541
0.504	0.919	0.3601	0.504	0.910	0.6712
0.707	0.919	0.9152	0.707	0.910	0.7006
1.000	1.000	1.0000	1.000	1.000	1.0000

TABLA VI-4 (CONTINUACIÓN)

TEMPERATURA=45 C			TEMPERATURA=60 C		
X	Y (EXP)	Y (ASOG)	X	Y (EXP)	Y (ASOG)
0.033	0.571	0.8312	0.033	0.560	0.8003
0.072	0.733	0.8413	0.072	0.705	0.8118
0.117	0.793	0.8534	0.117	0.768	0.8028
0.171	0.805	0.8241	0.171	0.773	0.7922
0.236	0.841	0.8177	0.236	0.811	0.7849
0.313	0.858	0.8167	0.318	0.823	0.7838
0.420	0.862	0.8236	0.420	0.843	0.7917
0.554	0.895	0.8433	0.554	0.868	0.8141
0.737	0.904	0.8877	0.737	0.880	0.8655
1.000	1.000	1.0000	1.000	1.000	1.0000

TABLA VI-5

SISTEMA: TERBUTANOL-AGUA

GRUPOS MOLÉCULA TERBUTANOL= 5

GRUPOS MOLÉCULA DE AGUA= 2

GRUPOS DISTINTOS EN LA MEZCLA= 2

PARÁMETROS DE GRUPO

V(1,1)=4

V(1,2)=0

V(2,1)=1

V(2,2)=1

A(1,1)=1.000

A(1,2)=3.335

A(2,1)=0.0147

A(2,2)=1.00

RESULTADOS

TEMPERATURA=25 C

X	Y (EXP)	Y (ASOG)
0.020	0.215	0.7675
0.048	0.435	0.6960
0.106	0.497	0.5460
0.239	0.520	0.4710
0.358	0.535	0.4376
0.432	0.557	0.4673
0.465	0.564	0.4784
0.649	0.630	0.5960
0.708	0.660	0.6420
0.760	0.722	0.7173
0.840	0.776	0.7371
0.878	0.840	0.8541

TEMPERATURA=40 C

X	Y (EXP)	Y (ASOG)
0.011	0.251	0.7753
0.024	0.412	0.7765
0.183	0.517	0.4723
0.370	0.549	0.4658
0.492	0.578	0.5112
0.635	0.636	0.6047
0.679	0.660	0.6400
0.754	0.710	0.7069

TEMPERATURA= 75 C

X	Y (EXP)	Y (ASOG)
0.010	0.332	0.7731
0.052	0.492	0.7024
0.133	0.517	0.5250
0.642	0.668	0.6140
0.735	0.723	0.6922
0.910	0.865	0.8797

TABLA VI-6
 SISTEMA: METANOL-AGUA

GRUPOS MOLECULA METANOL= 2
 GRUPOS MOLECULA DE AGUA= 2

GRUPOS DISTINTOS EN LA MEZCLA= 2

PARAMETROS DE GRUPO

V(1,1)=1 V(1,2)=1 V(2,1)=1 V(2,2)=0
 A(1,1)=1.000 A(1,2)=1.170 A(2,1)=0.047 A(2,2)=1.00

RESULTADOS

TEMPERATURA=35 C

X	Y (EXP)	Y (ASOG)
0.0408	0.2490	0.3346
0.0550	0.4343	0.3739
0.1087	0.5274	0.5719
0.2488	0.6703	0.6761
0.3800	0.7557	0.7476
0.4694	0.8284	0.8018
0.6012	0.8611	0.8534
0.7207	0.8671	0.9057
0.7951	0.9316	0.9314
0.8880	0.9636	0.9634
0.9000	0.9683	0.9676
0.9486	0.9815	0.9809

TEMPERATURA=50 C

X	Y (EXP)	Y (ASOG)
0.0453	0.2661	0.3324
0.0860	0.4057	0.4570
0.1387	0.5227	0.5475
0.1854	0.5898	0.6014
0.2107	0.7087	0.7006
0.4177	0.7684	0.7596
0.5411	0.8212	0.8193
0.6166	0.8520	0.8526
0.7578	0.9090	0.9111
0.8525	0.9455	0.9466
0.9514	0.9817	0.9828

TEMPERATURA=65 C

X	Y (EXP)	Y (ASOG)
0.0004	0.3726	0.4774
0.0074	0.4018	0.4078
0.1000	0.4963	0.5175
0.1816	0.5718	0.5763
0.2586	0.6512	0.6405
0.4920	0.7042	0.7619
0.5615	0.8242	0.8251

TABLA VI-7
SISTEMA AGUA-N-BUTANOL

GRUPOS MOLECULA N-BUTANOL= 5

GRUPOS MOLECULA DE AGUA= 2

GRUPOS DISTINTOS EN LA MEZCLA= 2

PARÁMETROS DE GRUPO

$V(1,1)=1$

$V(1,2)=1$

$V(2,1)=4$

$V(2,2)=0$

$A(1,1)=1.000$

$A(1,2)=0.0147$

$A(2,1)=0.305$

$A(2,2)=1.00$

RESULTADOS

FRACCIÓN MOL FASE VAPOR

x	TEMPERATURA			
	40	60	80	100
0.1	0.19623	0.22052	0.24059	0.27075
0.2	0.13329	0.15171	0.17033	0.17354
0.3	0.10301	0.14039	0.16143	0.13010
0.4	0.17137	0.15537	0.17462	0.19445
0.5	0.16037	0.18122	0.20271	0.22567
0.6	0.19785	0.22200	0.24742	0.27279
0.7	0.25642	0.28552	0.31468	0.34403
0.8	0.32323	0.32753	0.32131	0.45370
0.9	0.50846	0.57224	0.60657	0.63768
1.0	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000

TABLA VI-B
SISTEMA ETANOL-ETILBENCENO

GRUPOS MOLECULA ETILBENCENO= 8
GRUPOS MOLECULA DE ETANOL= 3

GRUPOS DISTINTOS EN LA MEZCLA= 3

P A R Á M E T R O S D E G R U P O

$$V(1,1)=6 \quad V(2,1)=2 \quad V(3,1)=0$$

$$V(1,2)=0 \quad V(2,2)=2 \quad V(3,2)=1$$

$$A(1,1)=1.000 \quad A(2,1)=0.7340 \quad A(3,1)=0.045$$

$$A(1,2)=1.240 \quad A(2,2)=1.0000 \quad A(3,2)=0.015$$

$$A(1,3)=0.534 \quad A(2,3)=0.3050 \quad A(3,3)=1.000$$

R E S U L T A D O S

FRACCIÓN MOL FASE VAPOR

TEMPERATURA

x	40	60	80	100
0.1	0.0692	0.06796	0.0658	0.0633
0.2	0.1013	0.09746	0.0965	0.0929
0.3	0.1197	0.11756	0.1141	0.1099
0.4	0.1324	0.13000	0.1262	0.1217
0.5	0.1429	0.14047	0.1364	0.1315
0.6	0.1541	0.15141	0.1471	0.1419
0.7	0.1690	0.16611	0.1614	0.1558
0.8	0.1954	0.19216	0.1869	0.1806
0.9	0.2652	0.26117	0.2546	0.2467
1.0	1.0000	1.00000	1.0000	1.0000

TABLA VI-9
 SISTEMA ÁCIDO ACÉTICO-ANH. ACÉTICO

GRUPOS MOLECULA AC. ACÉTICO=2
 GRUPOS MOLECULA ANH. ACÉTICO=4

GRUPOS DISTINTOS EN LA MEZCLA= 3

PARÁMETROS DE GRUPO

$$V(1,1)=1 \quad V(2,1)=1 \quad V(3,1)=0$$

$$V(1,2)=2 \quad V(2,2)=0 \quad V(3,2)=1$$

$$A(1,1)=1.000 \quad A(2,1)=0.0340 \quad A(3,1)=0.025$$

$$A(1,2)=1.133 \quad A(2,2)=1.0000 \quad A(3,2)=0.537$$

$$A(1,3)=0.7763 \quad A(2,3)=0.6200 \quad A(3,3)=1.000$$

RESULTADOS

FRACCIÓN MOL. FASE VAPOR

x	TEMPERATURA				
	20	40	60	80	100
0.1	0.7626	0.3467	0.3286	0.3890	0.2914
0.2	0.5263	0.3169	0.4837	0.4672	0.4454
0.3	0.6237	0.3075	0.6577	0.5069	0.5453
0.4	0.6925	0.6777	0.8537	0.6401	0.6197
0.5	0.7475	0.7111	0.7150	0.7002	0.6915
0.6	0.7950	0.7049	0.7790	0.7544	0.7370
0.7	0.8415	0.8321	0.8204	0.8632	0.7934
0.8	0.8855	0.8317	0.8730	0.8632	0.8524
0.9	0.9404	0.9264	0.9314	0.9257	0.9194
1.0	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000

TABLA VI-10
SISTEMA TOLUENO-FENOL

GRUPOS MOLECULA TOLUENO= 7

GRUPOS MOLECULA FENOL= 7

GRUPOS DISTINTOS EN LA MEZCLA= 3

PARÁMETROS DE GRUPO

$$V(1,1)=6 \quad V(2,1)=0 \quad V(3,1)=1$$

$$V(1,2)=6 \quad V(2,2)=1 \quad V(3,2)=0$$

$$A(1,1)=1.000 \quad A(2,1)=0.0450 \quad A(3,1)=1.240$$

$$A(1,2)=0.534 \quad A(2,2)=1.0000 \quad A(3,2)=0.320$$

$$A(1,3)=1.240 \quad A(2,3)=0.0245 \quad A(3,3)=1.000$$

RESULTADOS

FRACCIÓN MOL FASE VAPOR

TEMPERATURA

X	20	40	60	80
0.1	0.7305	0.8771	0.8561	0.8455
0.2	0.7540	0.9457	0.9224	0.8937
0.3	0.9757	0.9632	0.9469	0.9150
0.4	0.9818	0.9722	0.9598	0.9298
0.5	0.9855	0.9779	0.9680	0.9422
0.6	0.9882	0.9820	0.9739	0.9538
0.7	0.9904	0.9853	0.9787	0.9651
0.8	0.9925	0.9885	0.9833	0.9765
0.9	0.9951	0.9925	0.9890	0.9881
1.0	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000

TABLA VI-11
 SISTEMA TOLUENO-ÁCIDO PROPIONICO

GRUPOS MOLECULA ACIDO PROPIONICO=3
 GRUPOS MOLECULA TOLUENO =7

GRUPOS DISTINTOS EN LA MEZCLA= 3

PARAMETROS DE GRUPO

$$V(1,1)=2 \quad V(2,1)=1 \quad V(3,1)=0$$

$$V(1,2)=1 \quad V(2,2)=0 \quad V(3,2)=6$$

$$A(1,1)=1.000 \quad A(2,1)=0.0340 \quad A(3,1)=1.240$$

$$A(1,2)=1.133 \quad A(2,2)=1.0000 \quad A(3,2)=1.137$$

$$A(1,3)=0.734 \quad A(2,3)=0.0442 \quad A(3,3)=1.000$$

RESULTADOS

FRACCIÓN MOL FASE VAPOR

TEMPERATURA

X	40	60	80	100	120
0.1	0.0690	0.0847	0.1022	0.1212	0.1415
0.2	0.0989	0.1205	0.1442	0.1695	0.1961
0.3	0.1161	0.1439	0.1678	0.1965	0.2260
0.4	0.1293	0.1558	0.1853	0.2157	0.2473
0.5	0.1403	0.1698	0.2009	0.2335	0.2667
0.6	0.1511	0.1854	0.2193	0.2544	0.2897
0.7	0.1760	0.2105	0.2439	0.2843	0.3219
0.8	0.2143	0.2540	0.2951	0.3365	0.3774
0.9	0.3115	0.3609	0.4098	0.4559	0.5028
1.0	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000

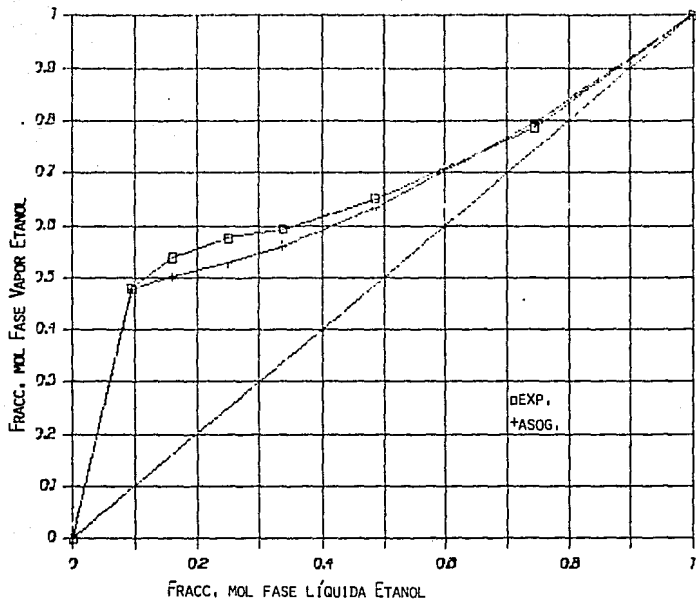
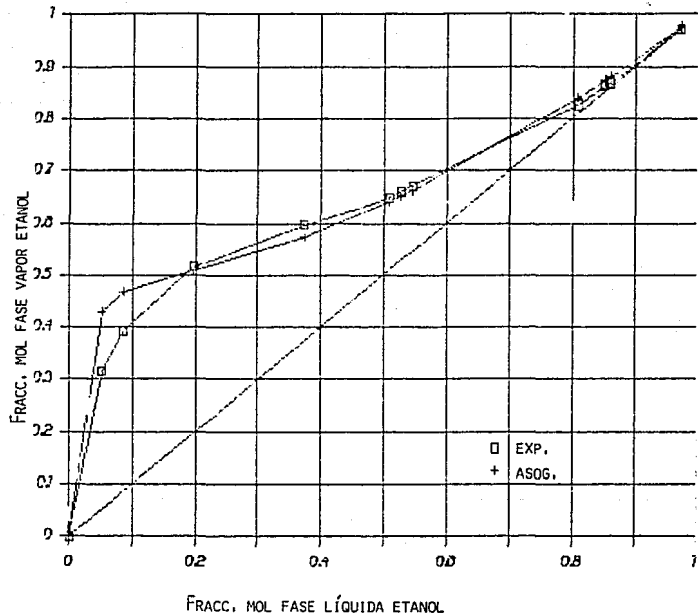


FIGURA VI-1. DIAGRAMA X-Y PARA EL SISTEMA ETANOL -AGUA A 50°C.



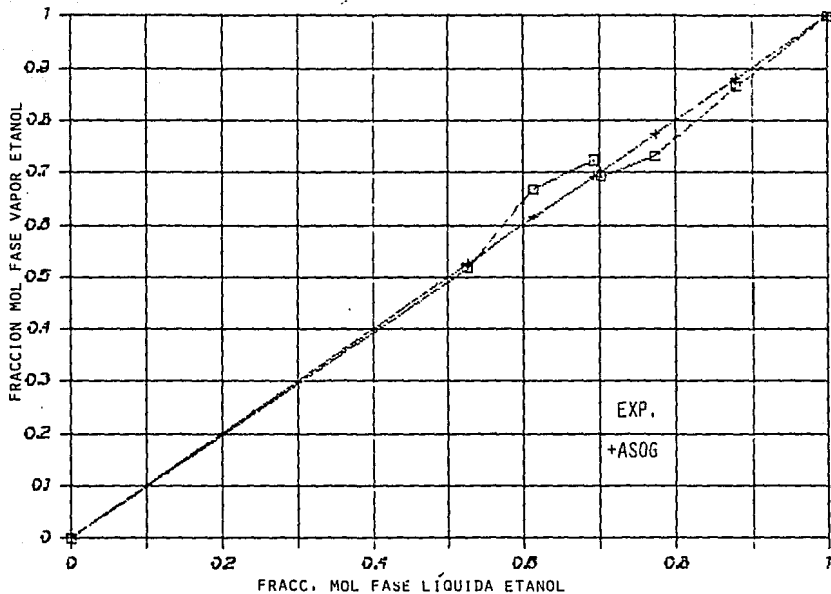


FIGURA VI-3. DIAGRAMA X-Y PARA EL SISTEMA ETANOL-AGUA A 75 °C.

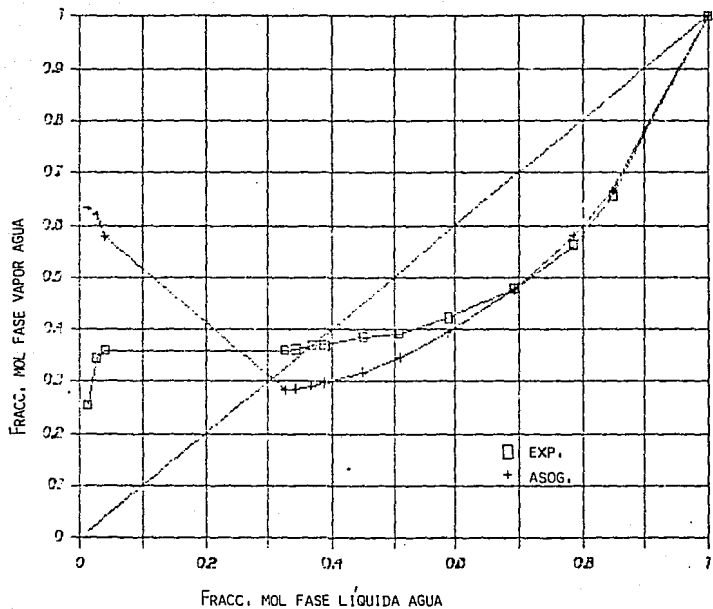


FIGURA VI-4. DIAGRAMA X-Y PARA EL SISTEMA AGUA-2-BUTANOL A 60°C.

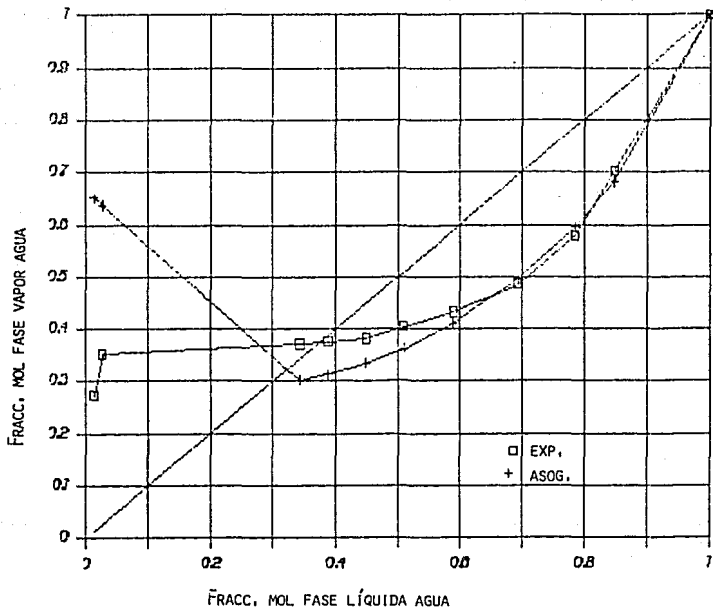


FIGURA VI-5. DIAGRAMA X-Y PARA EL SISTEMA AGUA-2-BUTANOL A 80°C.

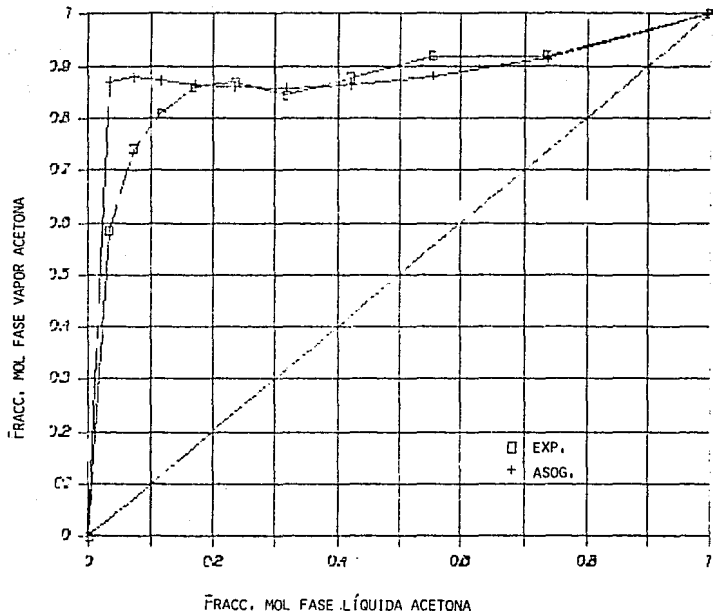


FIGURA VI-6, DIAGRAMA X-Y PARA EL SISTEMA ACETONA-AGUA A 25°C.

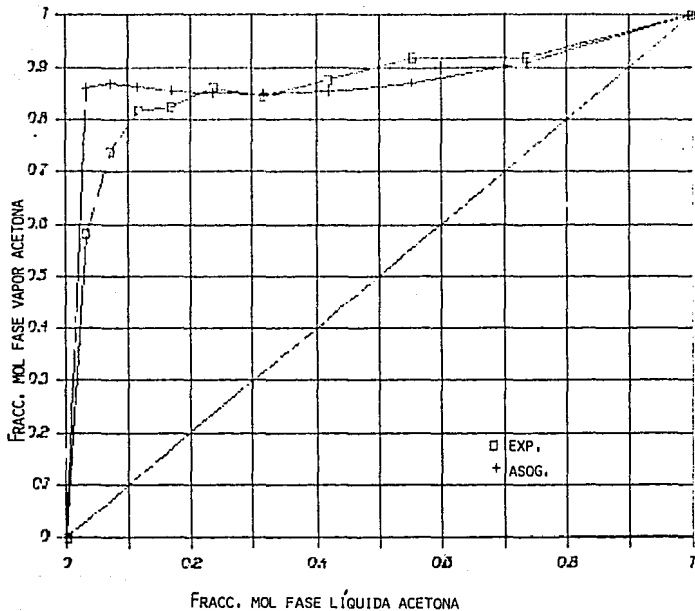


FIGURA VI-7. DIAGRAMA X-Y PARA EL SISTEMA ACETONA AGUA A 30°C.

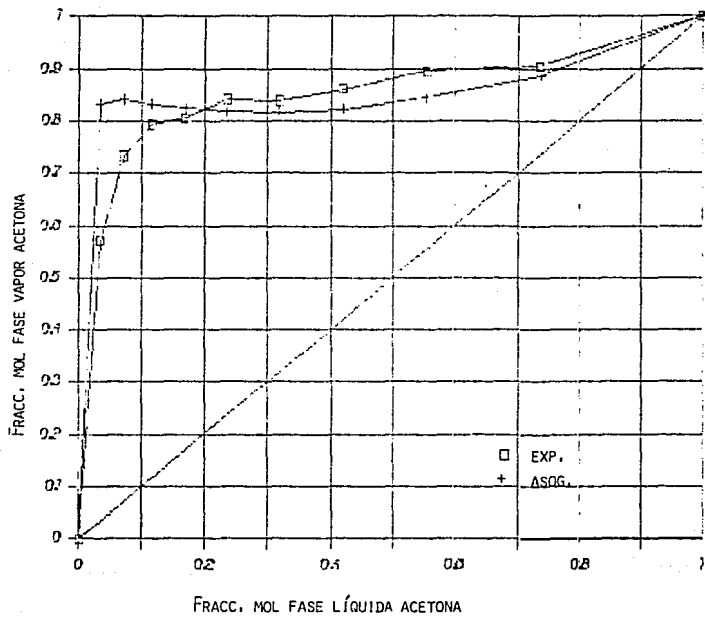


FIGURA VI-8. DIAGRAMA X-Y PARA EL SISTEMA ACETONA-AGUA A 45°C.

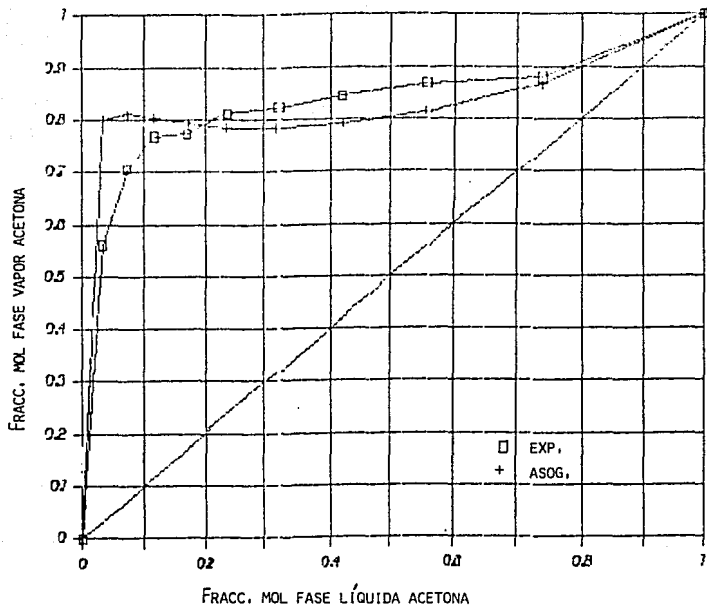


FIGURA VI-9. DIAGRAMA X-Y PARA EL SISTEMA ACETONA-AGUA A 60°C.

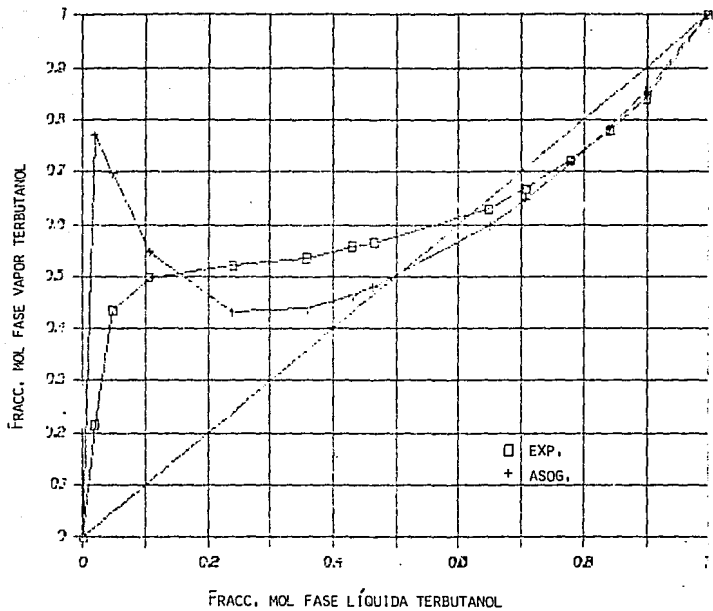


FIGURA VI-10, DIAGRAMA X-Y PARA EL SISTEMA TERBUTANOL-AGUA A 25°C.

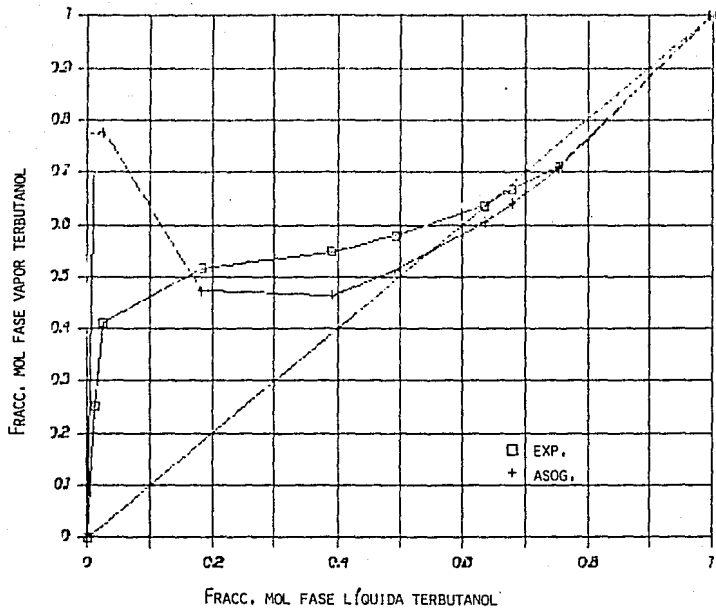


FIGURA VI-11. DIAGRAMA X-Y PARA EL SISTEMA TERBUTANOL-AGUA A 40°C.

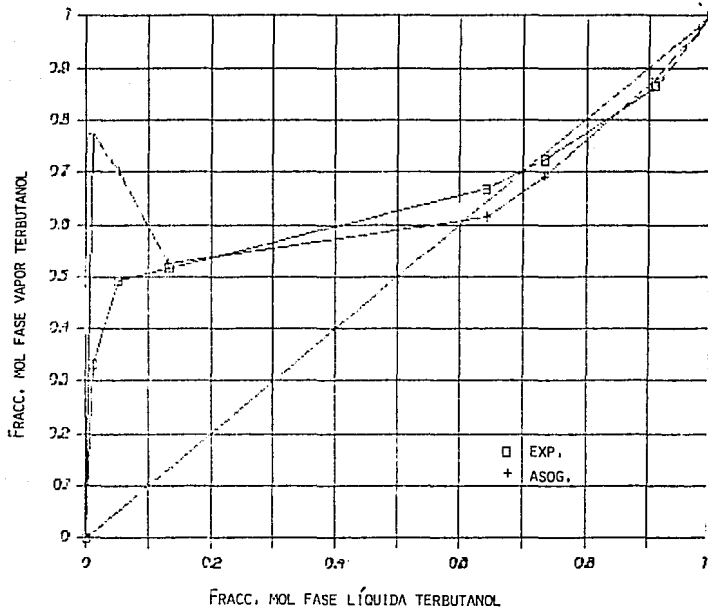


FIGURA VI-12. DIAGRAMA X-Y PARA EL SISTEMA TERBUTANOL-AGUA A 75°C.

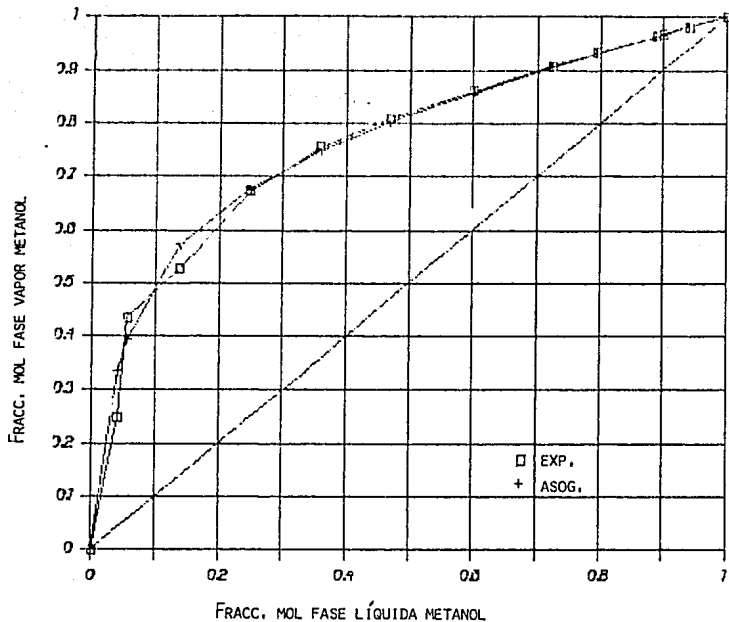


FIGURA VI-13, DIAGRAMA X-Y PARA EL SISTEMA METANOL-AGUA A 35°C.

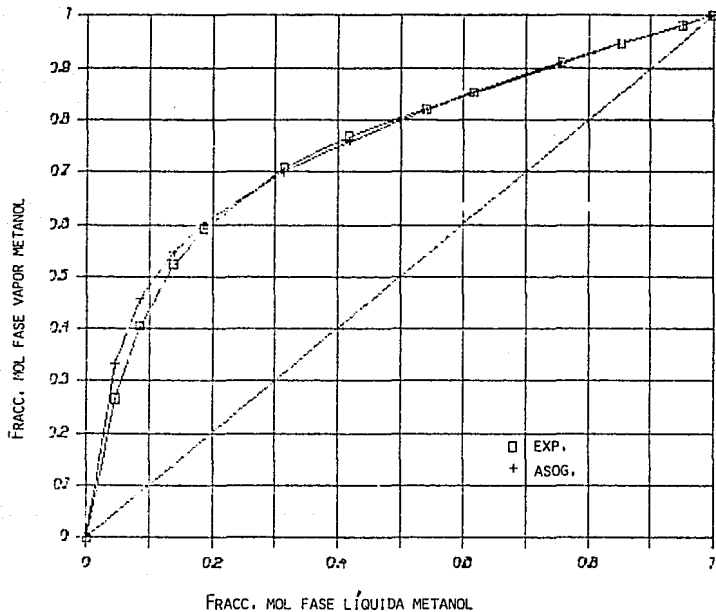


FIGURA VI-14, DIAGRAMA X-Y PARA EL SISTEMA METANOL-AGUA A 50°C.

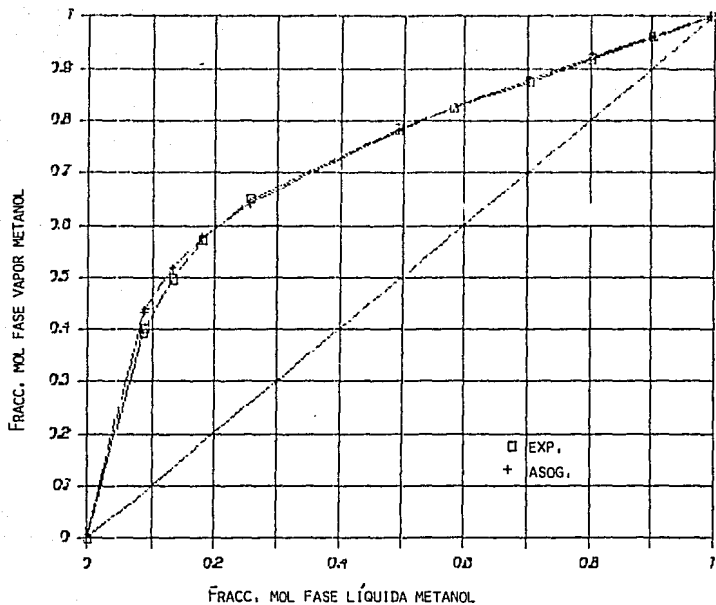


FIGURA VI-15. DIAGRAMA X-Y PARA EL SISTEMA METANOL-AGUA A 65°C.

B L O C Q U E B

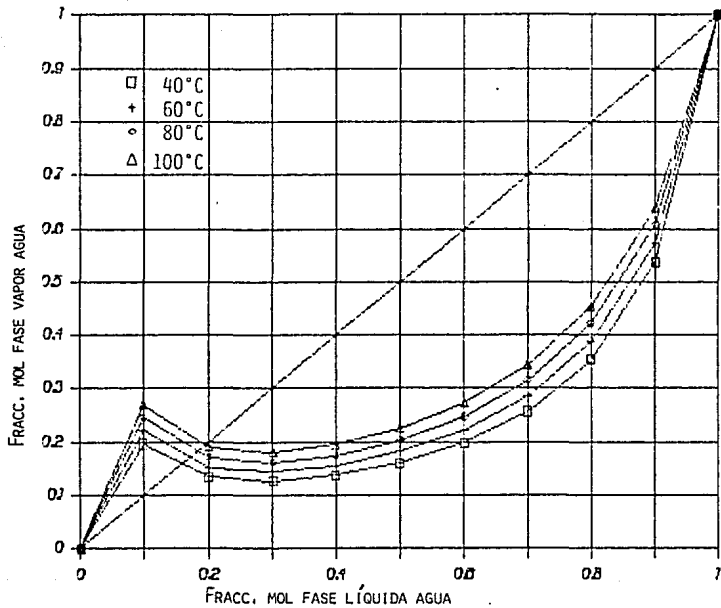


FIGURA VI-16. DIAGRAMA X-Y PARA EL SISTEMA AGUA-N-BUTANOL. VARIACIÓN POR TEMPERATURA, ESTIMACIÓN ASOG.

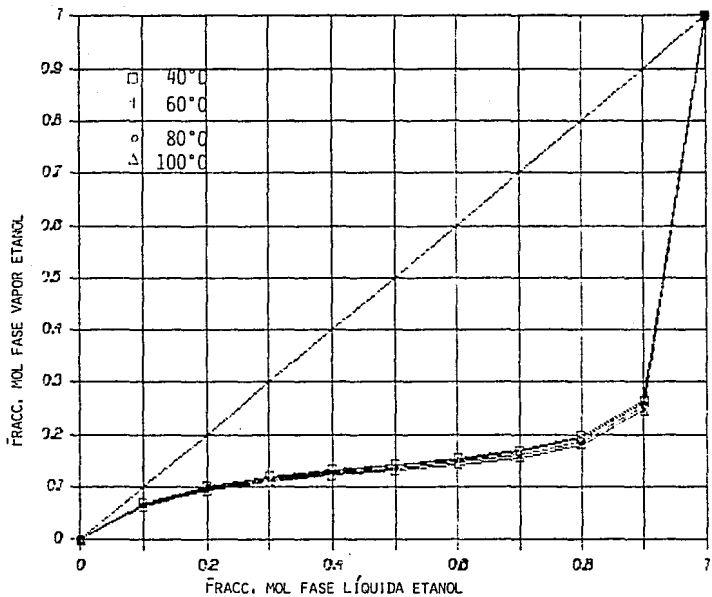


FIGURA VI-17. DIAGRAMA X-Y PARA EL SISTEMA ETANOL-ETILBENCENO. VARIACIÓN POR TEMPERATURA. ESTIMACIÓN ASOG.

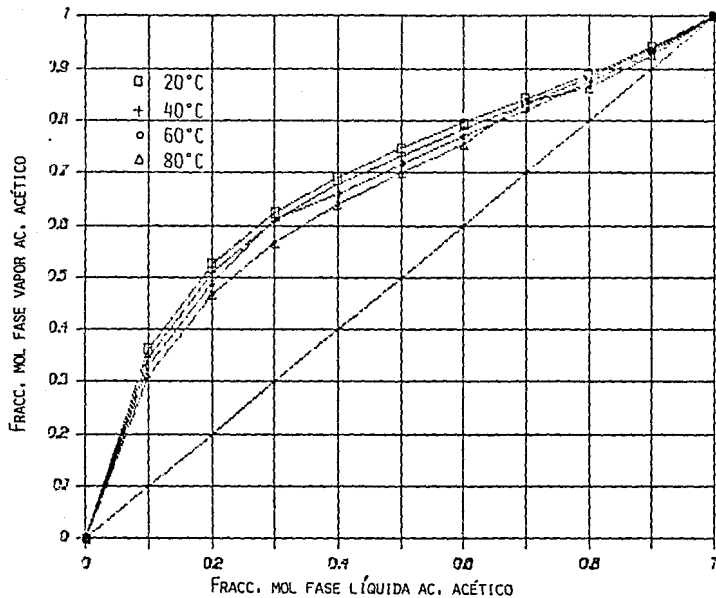


FIGURA VI-18. DIAGRAMA X-Y PARA EL SISTEMA AC. ACÉTICO-ANH. ACÉTICO
 VARIACIÓN POR TEMPERATURA. ESTIMACIÓN ASOG.

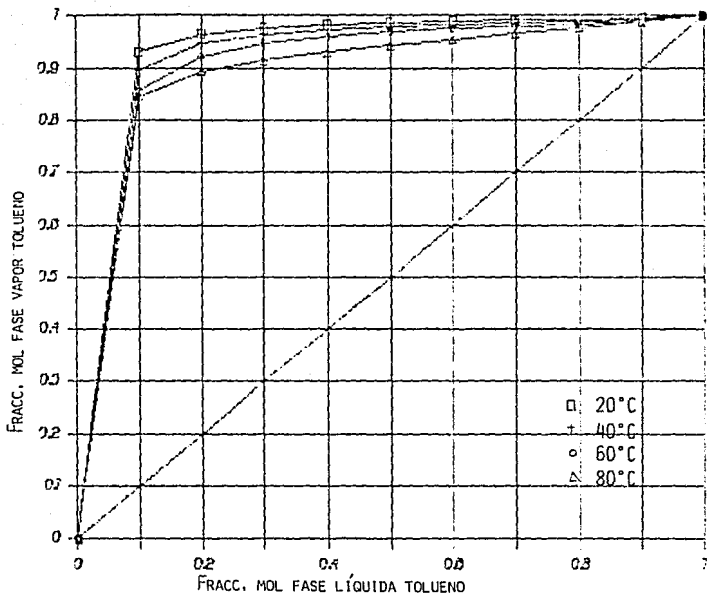


FIGURA VI-19. DIAGRAMA X-Y PARA EL SISTEMA TOLUENO-FENOL.
VARIACIÓN POR TEMPERATURA. ESTIMACIÓN ASOG.

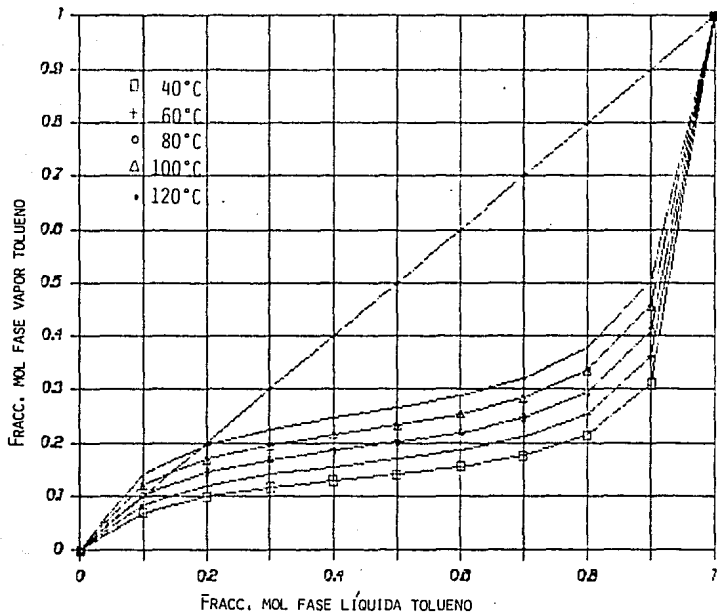


FIGURA VI-20. DIAGRAMA X-Y PARA EL SISTEMA TOLUENO-AC. PROPIÓNICO, VARIACIÓN POR TEMPERATURA. ESTIMACIÓN ASOG.

Capitulo VII

APLICACIÓN DE LOS RESULTADOS OBTENIDOS

Con objeto de enfocar los resultados proporcionados por el método que se prueba hacia un punto de vista directamente relacionado con la aplicación en el campo de la ingeniería química, se seleccionó la operación de destilación en un caso típico de diseño de una torre como medio para confrontar la efectividad real del método en este campo.

La comparación se establecerá en base al número mínimo de platos teóricos obtenidos con los datos experimentales en comparación con aquéllos resultado de la aplicación de los datos proporcionados por una corrida de trabajo, en condiciones similares.

Esta operación se realizará con algunos de los sistemas más representativos presentados anteriormente. Para el trazo del número mínimo de platos teóricos se requiere conocer los valores para las concentraciones esperadas del destilado y del residuo, X_d y X_w , respectivamente. Dichos valores podrían obtenerse del balance de un problema específico de destilación para cada sistema; sin embargo, considerando que al final los valores de las concentraciones mencionadas se aplicarán por igual a los datos experimentales y a los estimados en este trabajo, se fijarán arbitrariamente para cada uno de los casos detallados a continuación y se especificarán en la gráfica correspondiente.

SISTEMA ETANOL-AGUA

TEMPERATURA= 50 C

Número mínimo de platos teóricos (exp)= 11.7

Número mínimo de platos teóricos (asog)= 11.5

Fig.VII-1

TEMPERATURA= 60.6 C

Número mínimo de platos teóricos (exp)= 4.0

Número mínimo de platos teóricos (asog)= 3.9

Fig.VII-2

SISTEMA ACETONA-AGUA

TEMPERATURA= 25 C

Número mínimo de platos teóricos (exp)= 2.3

Número mínimo de platos teóricos (asog)= 2.0

Fig.VII-3

TEMPERATURA= 30 C

Número mínimo de platos teóricos (exp)= 1.9

Número mínimo de platos teóricos (asog)= 1.9

Fig.VII-4

TEMPERATURA= 45 C

Número mínimo de platos teóricos (exp)= 2.95

Número mínimo de platos teóricos (asog)= 2.8

Fig.VII-5

TEMPERATURA= 60 C

Número mínimo de platos teóricos (exp)= 3.5

Número mínimo de platos teóricos (asog)= 3.9

Fig.VII-6

SISTEMA METANOL-AGUA

TEMPERATURA= 35 C

Número mínimo de platos teóricos (exp)= 3.9

Número mínimo de platos teóricos (asog)= 3.7

Fig.VII-7

TEMPERATURA=50 C

Número mínimo de platos teóricos (exp)= 3.9

Número mínimo de platos teóricos (asog)= 3.8

Fig.VII-8

TEMPERATURA=65 C

Número mínimo de platos teóricos (exp)= 4.5

Número mínimo de platos teóricos (asog)= 4.3

Fig.VII-9

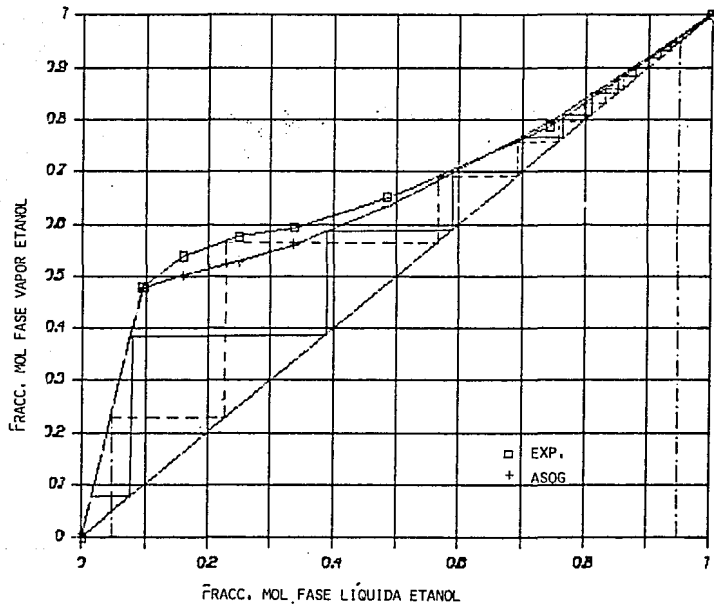


FIGURA VII-1. DETERMINACIÓN GRÁFICA DEL NUM. MÍNIMO DE PLATOS TEÓRICOS PARA EL SISTEMA ETANOL-AGUA A 50°C.

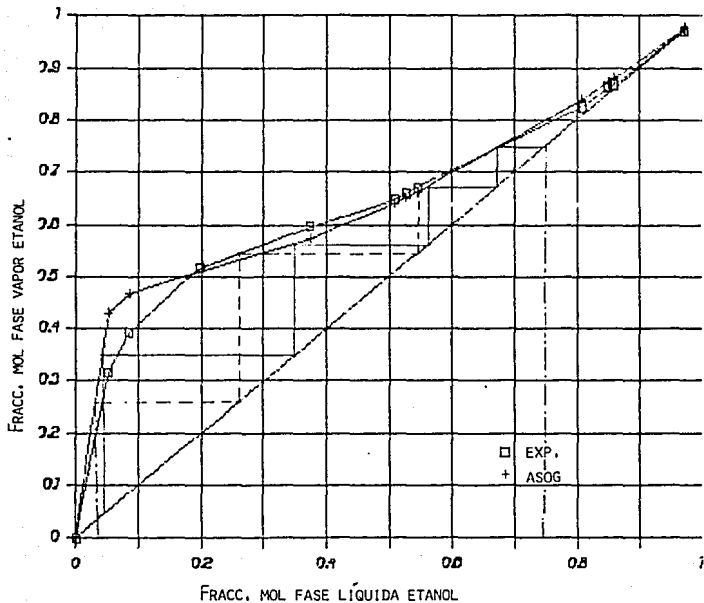


FIGURA VII-2; DETERMINACIÓN GRÁFICA DEL NUM. MÍNIMO DE PLATOS TEÓRICOS PARA EL SISTEMA ETANOL-AGUA A 60°C.

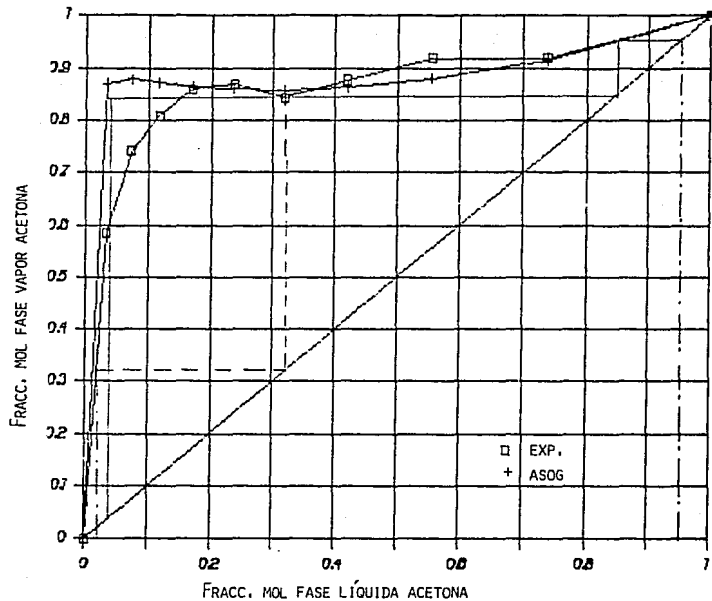


FIGURA VII-3. DETERMINACIÓN GRÁFICA DEL NUM, MÍNIMO DE PLATOS TEÓRICOS PARA EL SISTEMA ACETONA-AGUA A 25°C.

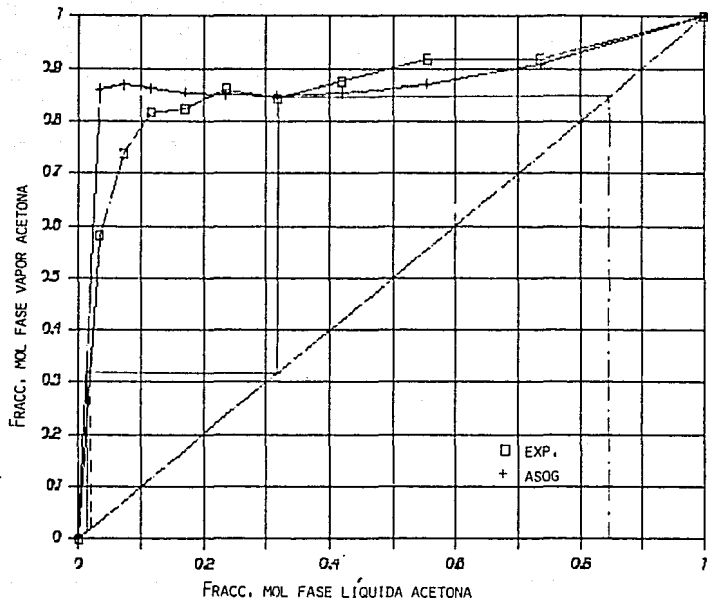


FIGURA VII-4, DETERMINACIÓN GRÁFICA DEL NUM. MÍNIMO DE PLATOS TEÓRICOS PARA EL SISTEMA ACETONA-AGUA A 30°C.

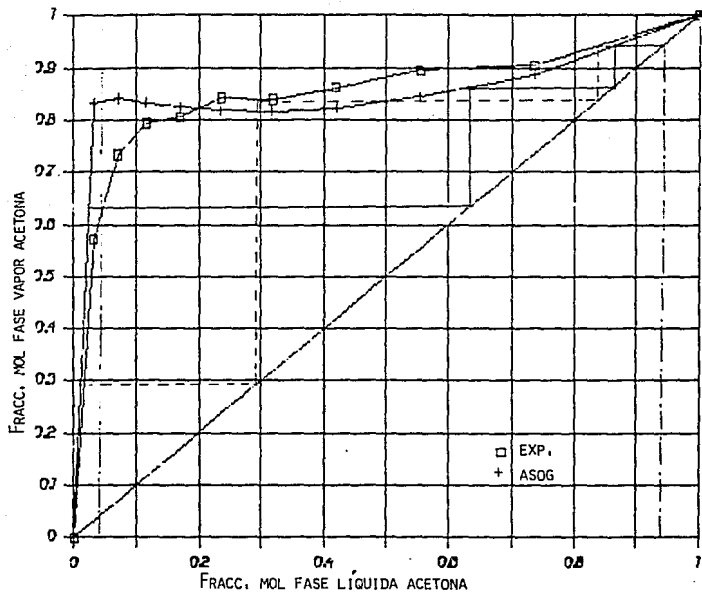


FIGURA VII-5. DETERMINACIÓN GRÁFICA DEL NUM. MÍNIMO DE PLATOS TEÓRICOS PARA EL SISTEMA ACETONA-AGUA A 45°C.

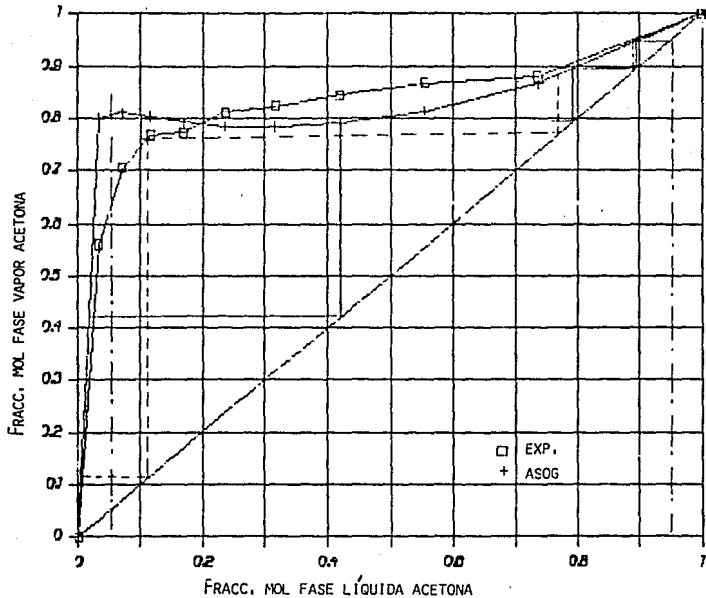


FIGURA VII-6, DETERMINACIÓN GRÁFICA DEL NUM. MÍNIMO DE PLATOS TEÓRICOS PARA EL SISTEMA ACETONA-AGUA A 60°C.

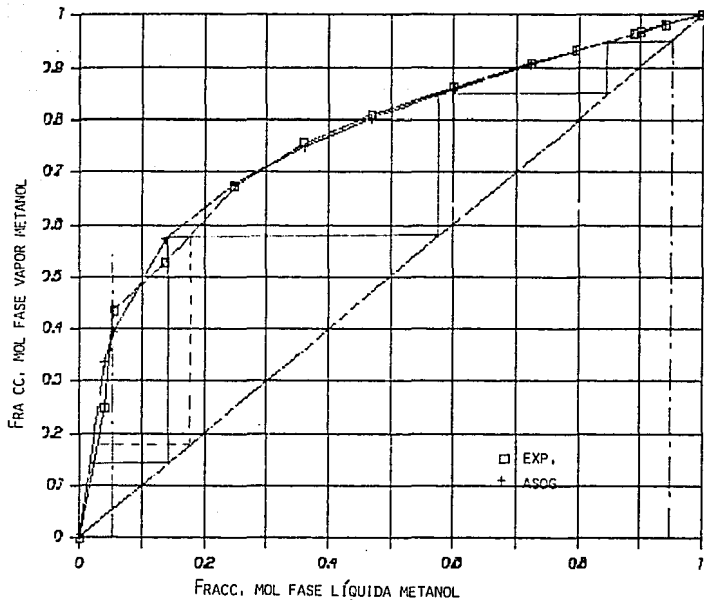


FIGURA VII-7. DETERMINACIÓN GRÁFICA DEL NUM. MÍNIMO DE PLATOS TEÓRICOS PARA EL SISTEMA METANOL-AGUA A 35°C.

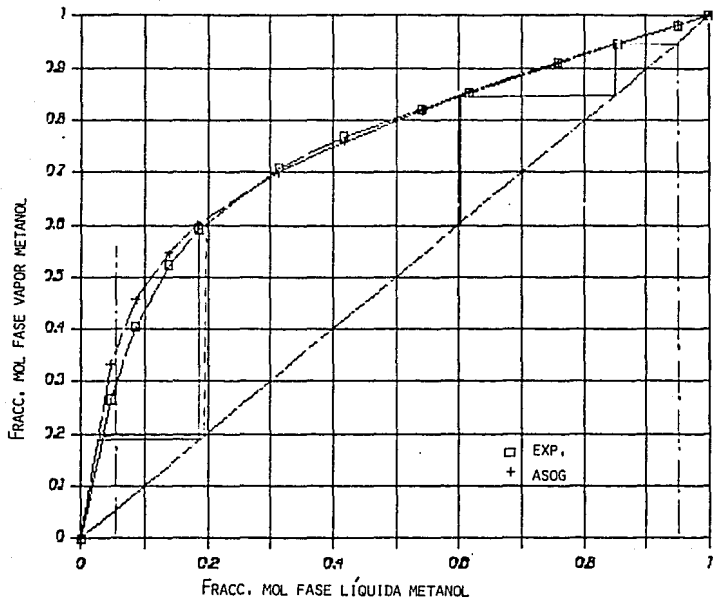


FIGURA VII-8. DETERMINACIÓN GRÁFICA DEL NUM. MÍNIMO DE PLATOS TEÓRICOS PARA EL SISTEMA METANOL-AGUA A 50°C.

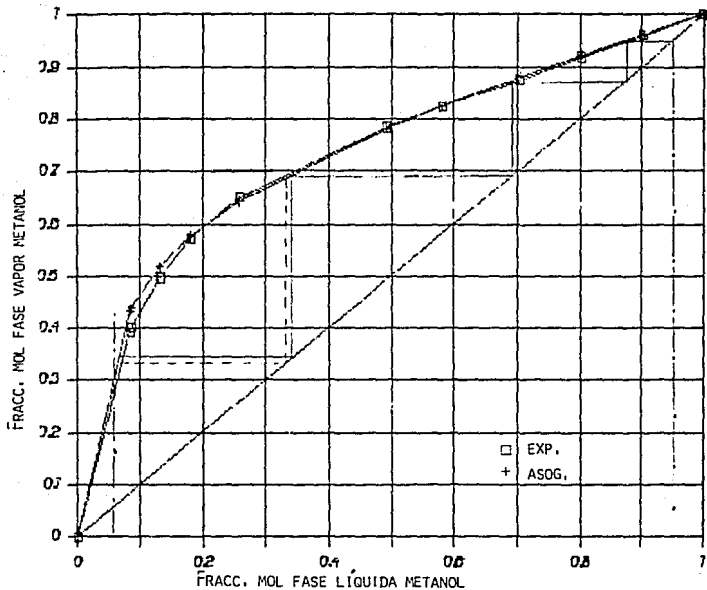


FIGURA VII-9. DETERMINACIÓN GRÁFICA DEL NUM. MÍNIMO DE PLATOS TEÓRICOS PARA EL SISTEMA METANOL-AGUA A 65°C.

TABLA VII -1

ANÁLISIS DE PESAJEROS

SISTEMA: ACRILONITRIL-ADIA

TEMPERATURA 75 C

Y	Y(E)P	Y(A)S(6)	Y(E)-Y(A)E	PPOR(%)	PPOR ²
0.0012	0.100	0.1051	0.0039	1.96%	0.04%
0.0076	0.316	0.3181	0.0021	-0.06%	0.02%
0.0035	0.401	0.4032	0.0022	-0.55%	0.00%
0.0051	0.571	0.4893	0.0827	10.48%	2.18%
0.0064	0.510	0.5389	0.0289	-5.65%	0.32%
0.0090	0.575	0.6077	0.0327	-5.69%	0.32%
0.0108	0.653	0.6447	0.0083	1.27%	0.02%
0.0132	0.685	0.6880	0.0028	0.73%	0.01%
0.0154	0.713	0.7042	0.0088	1.23%	0.02%
0.0172	0.732	0.7294	0.0026	1.58%	0.03%
0.0198	0.754	0.7392	0.0148	1.96%	0.04%
0.0201	0.762	0.7411	0.0209	2.74%	0.08%
0.0207	0.760	0.7448	0.0152	2.00%	0.04%
0.0214	0.783	0.7468	0.0342	4.37%	0.19%
0.0233	0.777	0.7586	0.0184	2.37%	0.06%
0.0244	0.777	0.7637	0.0133	1.71%	0.03%
0.0251	0.786	0.7667	0.0193	2.46%	0.06%
0.0258	0.788	0.7695	0.0185	2.35%	0.06%
			EPPOR CUADRADO		4.71%
			EPPOR MEDIO		1.14%

TEMPERATURA 40 C

Y	Y(E)P	Y(A)S(6)	Y(E)-Y(A)E	PPOR(%)	PPOR ²
0.0013	0.176	0.1760	0.0020	-1.14%	0.01%
0.0025	0.285	0.2891	0.0041	-1.44%	0.02%
0.0049	0.422	0.4321	0.0101	-2.39%	0.06%
0.0113	0.592	0.6036	0.0166	-2.80%	0.08%
0.0172	0.683	0.6880	0.0056	0.38%	0.00%
0.0224	0.700	0.7172	0.0172	-1.16%	0.01%
0.0241	0.722	0.7261	0.0041	-0.57%	0.00%
0.0258	0.731	0.7281	0.0049	0.67%	0.00%
0.0273	0.720	0.7407	0.0207	-2.81%	0.08%
			EPPOR CUADRADO		0.27%
			EPPOR MEDIO		0.28%

TABLA VII -2

ANÁLISIS DE RESULTADOS

SISTEMA: ETANOL-AGUA

TEMP=5º C

Y	Y'(F)P	Y'(ASOG)	Y'(F)-Y'(A)(EPPOP(%)	EPPOP(%)
0.0956	0.4796	0.4780	0.0016	0.33%
0.1688	0.5384	0.5010	0.0374	6.95%
0.2500	0.5749	0.5282	0.0467	8.12%
0.3366	0.5934	0.5608	0.0326	5.49%
0.4879	0.6589	0.6329	0.0260	2.77%
0.7455	0.7850	0.7055	(0.0795)	-1.22%
			EPPOP CUADRADO	1.537%
			EPPOP MEDIO	0.256%

TEMP=60.6 C

Y	Y'(F)P	Y'(ASOG)	Y'(F)-Y'(A)(EPPOP(%)	EPPOP(%)
0.0510	0.3160	0.4290	(0.1130)	-36.01%
0.0860	0.3030	0.4680	(0.0750)	-10.00%
0.1970	0.5170	0.5076	0.0094	1.82%
0.3750	0.5960	0.5735	0.0225	3.70%
0.5070	0.6400	0.6412	0.0008	1.05%
0.5270	0.6600	0.6514	0.0086	1.30%
0.5450	0.6710	0.6610	0.0100	1.37%
0.6050	0.6260	0.6105	0.0155	-1.63%
0.6510	0.6620	0.6731	(0.0111)	-1.29%
0.8600	0.8670	0.8000	0.0670	-1.50%
0.9720	0.9720	0.9750	(0.0030)	-0.31%
			EPPOP CUADRADO	16.80%
			EPPOP MEDIO	3.74%

TEMP=75 C

Y	Y'(F)P	Y'(ASOG)	Y'(F)-Y'(A)(EPPOP(%)	EPPOP(%)
0.5250	0.5170	0.5250	(0.0000)	-1.55%
0.6136	0.6600	0.6136	0.0464	8.14%
0.6922	0.7230	0.6922	0.0308	4.26%
0.7024	0.4920	0.7024	(0.2104)	-42.76%
0.7731	0.3320	0.7731	(0.4411)	-132.86%
0.8707	0.8650	0.8707	(0.0057)	-1.70%
			EPPOP CUADRADO	195.707%
			EPPOP MEDIO	32.610%

TABLA VII -3

ANÁLISIS DE RESULTADOS **ESTA TESIS NO DEBE SALIR DE LA BIBLIOTECA**
 SISTEMA: ARIA-2-PUTAN

TEMPERATURA 60 °C

T	Y(E)P	Y(A)SG	Y(E)-Y(A)	EPPO*(X)	EPPO*2
0.013	0.255	0.6348	(0.3793)	-148.94%	221.63%
0.027	0.345	0.6199	(0.2749)	-79.68%	63.49%
0.039	0.360	0.5784	(0.2184)	-60.67%	36.60%
0.326	0.360	0.2840	0.0760	21.11%	4.46%
0.343	0.362	0.2867	0.0753	20.80%	4.33%
0.369	0.369	0.2923	0.0767	20.79%	4.32%
0.389	0.370	0.2976	0.0724	19.57%	3.83%
0.449	0.386	0.3182	0.0678	17.56%	3.09%
0.510	0.392	0.3462	0.0458	11.69%	1.37%
0.589	0.423	0.3531	0.0799	7.07%	0.50%
0.693	0.478	0.4765	0.0015	0.31%	0.00%
0.786	0.561	0.5786	(0.0176)	-3.16%	0.10%
0.847	0.655	0.6653	(0.0103)	-1.57%	0.02%
1.000	1.000	1.0000	0.0000	0.01%	0.00%
				EPPO CUADRADO	344.14%
				EPPO MEDIO	13.25%

TEMPERATURA 80 °C

T	Y(E)P	Y(A)SG	Y(E)-Y(A)	EPPO*(X)	EPPO*2
0.013	0.273	0.6517	(0.3787)	-138.72%	192.43%
0.027	0.352	0.6370	(0.2850)	-80.97%	65.55%
0.343	0.372	0.3020	0.0700	18.82%	3.54%
0.389	0.376	0.3131	0.0629	16.73%	2.80%
0.449	0.381	0.3343	0.0467	12.26%	1.50%
0.510	0.405	0.3630	0.0420	10.37%	1.08%
0.589	0.432	0.4198	0.0122	4.91%	0.24%
0.693	0.484	0.4948	(0.0100)	-2.23%	0.05%
0.786	0.578	0.5964	(0.0184)	-3.18%	0.10%
0.847	0.702	0.6815	0.0205	2.92%	0.09%
1.000	1.000	1.0000	(0.0000)	0.00%	0.00%
				EPPO CUADRADO	267.38%
				EPPO MEDIO	14.87%

ANÁLISIS DE RESULTADOS

SISTEMA: ACETONA-AGUA

TEMPERATURA 25 C

I	Y(E1P)	Y(AS06)	Y(E1)-Y(A)ERROR(%)	ERROR*2	
0.033	0.585	0.8705	(0.2855)	-49.00%	23.82%
0.072	0.740	0.8785	(0.1385)	-18.72%	3.50%
0.117	0.809	0.8722	(0.0642)	-7.95%	0.63%
0.171	0.859	0.8547	(0.0057)	-0.66%	0.00%
0.236	0.859	0.8595	0.0005	1.09%	0.01%
0.310	0.844	0.8587	(0.0147)	-1.74%	0.03%
0.420	0.877	0.8543	0.0127	1.45%	0.02%
0.554	0.919	0.8881	0.0309	4.23%	0.18%
0.737	0.919	0.9152	0.0038	0.41%	0.00%
1.000	1.000	1.0001	0.0000	0.00%	0.00%
ERROR CUADRADO				20.20%	
ERROR MEDIO				5.31%	

TEMPERATURA 30 C

I	Y(E1P)	Y(AS06)	Y(E1)-Y(A)ERROR(%)	ERROR*2	
0.033	0.580	0.8699	-0.2899	-48.43%	23.46%
0.072	0.738	0.8595	-0.1315	-17.82%	3.17%
0.117	0.817	0.8628	-0.0458	-5.61%	0.31%
0.171	0.825	0.8548	-0.0298	-3.61%	0.13%
0.236	0.862	0.8493	0.0127	1.47%	0.02%
0.310	0.844	0.8485	-0.0045	-0.53%	0.00%
0.420	0.876	0.8544	0.0216	2.47%	0.06%
0.554	0.918	0.8712	0.0468	5.10%	0.26%
0.737	0.918	0.9026	0.0154	1.52%	0.01%
1.000	1.000	1.0000	0.0000	0.00%	0.00%
ERROR CUADRADO				27.43%	
ERROR MEDIO				5.24%	

TABLA VII -5

71

SISTEMA ACETONA-AGUA

TEMPERATURA 45 C

x	$Y(E)P$	$Y(A)Q$	$Y(E)-Y(A)$	ERROR(X)	ERROR ²
4.433	0.571	0.8312	-0.2602	-45.57%	29.77%
0.472	0.753	0.8413	-0.1093	-14.77%	2.18%
0.117	0.793	0.8334	-0.0404	-5.09%	0.26%
0.171	0.805	0.8241	-0.0191	-2.37%	0.05%
0.236	0.841	0.8177	0.0233	2.77%	0.08%
0.319	0.839	0.8167	0.0223	2.54%	0.06%
0.420	0.862	0.8236	0.0384	4.45%	0.20%
0.554	0.895	0.8433	0.0517	5.78%	0.33%
0.737	0.984	0.8877	0.0963	1.08%	0.03%
1.000	1.000	1.0000	0.0000	0.01%	0.00%
				ERROR CUADRADO	23.97%
				ERROR MEDIO	4.90%

TEMPERATURA 50 C

x	$Y(E)P$	$Y(A)Q$	$Y(E)-Y(A)$	ERROR(X)	ERROR ²
4.433	0.564	0.8943	(0.2403)	-42.91%	18.41%
0.472	0.705	0.8118	(0.1068)	-15.15%	2.29%
0.117	0.762	0.8828	(0.4348)	-4.53%	0.21%
0.171	0.773	0.7922	(0.0192)	-2.40%	0.06%
0.236	0.811	0.7849	0.0261	3.22%	0.10%
0.319	0.823	0.7839	0.0392	4.76%	0.23%
0.420	0.843	0.7917	0.0513	6.09%	0.37%
0.554	0.868	0.8141	0.0539	6.21%	0.39%
0.737	0.889	0.8655	0.0245	1.65%	0.03%
1.000	1.000	1.0000	(0.0000)	0.00%	0.00%
				ERROR CUADRADO	22.09%
				ERROR MEDIO	4.70%

TABLA VII -6

ANALISIS DE RESULTADOS

SISTEMA TERRUTANDI-AGUA

TEMPERATURA 25 C

Y	Y(EIP)	Y(ASOG)	Y(E)-Y(A)EPPOR(%)	EPOR*2	
0.020	0.215	0.7895	(0.5545)	-257.91%	665.16%
0.040	0.435	0.6960	(0.2610)	-60.00%	36.00%
0.100	0.497	0.5460	(0.0490)	-9.86%	0.97%
0.239	0.520	0.4310	0.0890	17.12%	2.93%
0.350	0.535	0.4376	0.0974	18.21%	3.31%
0.432	0.557	0.4633	0.0937	16.82%	2.83%
0.465	0.564	0.4784	0.0856	15.18%	2.30%
0.619	0.630	0.5900	0.0320	5.00%	0.26%
0.700	0.660	0.6100	0.0200	2.99%	0.09%
0.780	0.722	0.7173	0.0047	0.65%	0.00%
0.840	0.770	0.7831	(0.0051)	-0.66%	0.00%
0.890	0.840	0.8541	(0.0141)	-1.68%	0.03%
				EPOR CUADRADO	48.73%
				EPOR MEDIO	5.00%

TEMPERATURA 40 C

Y	Y(EIP)	Y(ASOG)	Y(E)-Y(A)EPPOR(%)	EPOR*2	
0.011	0.251	0.7753	(0.5243)	-208.80%	436.33%
0.024	0.412	0.7765	(0.3645)	-88.47%	78.27%
0.103	0.517	0.4723	0.0447	6.65%	0.75%
0.390	0.549	0.4650	0.0832	15.15%	2.30%
0.492	0.576	0.5112	0.0668	11.56%	1.34%
0.635	0.636	0.6047	0.0313	4.92%	0.24%
0.679	0.660	0.6400	0.0200	4.19%	0.18%
0.754	0.710	0.7069	0.0031	0.44%	0.00%
				EPOR CUADRADO	81.07%
				EPOR MEDIO	11.39%

TEMPERATURA 75 C

Y	Y(EIP)	Y(ASOG)	Y(E)-Y(A)EPPOR(%)	EPOR*2	
0.010	0.332	0.7731	(0.4411)	-132.86%	176.52%
0.052	0.492	0.7024	(0.2104)	-42.76%	18.29%
0.133	0.517	0.5250	(0.0000)	-1.55%	0.02%
0.642	0.660	0.6140	0.0460	6.98%	0.65%
0.735	0.723	0.6922	0.0308	4.26%	0.18%
0.910	0.865	0.8797	(0.0147)	-1.70%	0.03%
				EPOR CUADRADO	19.18%
				EPOR MEDIO	7.29%

TABLA VII -7

ANÁLISIS DE RESULTADOS

73

SISTEMA: METANOL-AGUA

TEMPERATURA 35 C

T	Y(E)P	Y(ASOG)	Y(E)-Y(A)	ERROR(%)	ERROR ²
0.0408	0.2490	0.3345	(0.0955)	-34.37%	11.81%
0.4553	0.4343	0.3939	0.0404	9.30%	0.87%
0.1337	0.5274	0.5719	(0.0445)	-9.44%	0.71%
0.2408	0.6738	0.6781	(0.0043)	-0.63%	0.00%
0.3603	0.7559	0.7476	0.0083	1.10%	0.01%
0.4694	0.8024	0.8418	0.0394	0.81%	0.01%
0.6012	0.8611	0.8594	0.0017	0.31%	0.00%
0.7239	0.9071	0.9057	0.0014	0.15%	0.00%
0.7951	0.9316	0.9314	0.0002	0.02%	0.00%
0.8204	0.9636	0.9634	0.0002	0.02%	0.00%
0.9005	0.9683	0.9676	0.0007	0.07%	0.00%
0.9406	0.9815	0.9809	0.0006	0.07%	0.00%
				ERROR CUADRADO	13.41%
				ERROR MEDIO	3.05%

TEMPERATURA 50 C

T	Y(E)P	Y(ASOG)	Y(E)-Y(A)	ERROR(%)	ERROR ²
0.0453	0.2661	0.3324	-0.0663	-24.92%	6.21%
0.0863	0.4057	0.4570	-0.0513	-12.65%	1.60%
0.1307	0.5227	0.5475	-0.0248	-4.75%	0.23%
0.1854	0.5898	0.6014	-0.0116	-1.97%	0.04%
0.3137	0.7007	0.7006	0.0001	1.15%	0.01%
0.4177	0.7684	0.7576	0.0108	1.15%	0.01%
0.5411	0.8212	0.8193	0.0019	0.23%	0.00%
0.6166	0.8520	0.8526	-0.0006	-0.07%	0.00%
0.7500	0.9000	0.9111	-0.0111	-0.23%	0.00%
0.8525	0.9455	0.9466	-0.0011	-0.12%	0.00%
0.9514	0.9817	0.9820	-0.0003	-0.11%	0.00%
				ERROR CUADRADO	8.10%
				ERROR MEDIO	2.59%

TABLA VII -8

74

SISTEMA: METANOL-AGUA

TEMPERATURA 65 C

T	Y(E _T)	Y(A ₀₅)	Y(E) - Y(A)	ERROR(%)	ERROR ²
0.0054	0.3926	0.4334	(0.0408)	-10.38%	1.08%
0.0074	0.4019	0.4379	(0.0360)	-8.96%	0.80%
0.1320	0.4963	0.5175	(0.0212)	-4.27%	0.18%
0.1816	0.5718	0.5763	(0.0045)	-0.79%	0.01%
0.2586	0.6512	0.6435	0.0077	1.19%	0.01%
0.4920	0.7942	0.7919	0.0023	0.29%	0.00%
0.5015	0.8242	0.8251	(0.0009)	-0.11%	0.00%
0.7043	0.9747	0.9809	(0.0061)	-0.70%	0.00%
0.8920	0.9120	0.9217	(0.0097)	-1.06%	0.00%
0.9030	0.9605	0.9622	(0.0017)	-0.18%	0.00%
			ERROR CUADRADO		2.09%
			ERRFCR MEDIO		1.45%

Capitulo VIII

DISCUSIÓN DE RESULTADOS

Realizando un análisis sobre el error encontrado en cada una de las corridas de trabajo presentadas e incluidas en el capítulo anterior, se observa que para todos los casos, el error registrado es muy significativo en la zona donde se manejan fracciones de líquido inferiores a 0.1; sin embargo, este comportamiento no es exclusivo del método que se prueba dado que cualquier otro medio utilizado para obtener valores de concentración, incluido el experimental, muestran el mismo comportamiento en esa gama de concentraciones (quizá la única excepción sea la utilización de la cromatografía de gases).

Conforme el valor de la concentración aumenta, el grado de ajuste es muy aceptable dado que el error registrado fluctúa entre 2 y 5 %.

En el extremo de concentraciones elevadas, el método no presenta errores apreciables aunque sí es evidente una cierta falta de resolución para mostrar azeótropos, fenómeno que se presentó en algunos de los sistemas estudiados. Para tratar de evitar lo anterior, en algunas ocasiones es recomendable obtener sólo un punto del diagrama por el método de grupos y utilizarlo para calcular los demás puntos usando la ecuación de Wilson u otra adecuada, para tratar de mejorar la exactitud del ajuste.

Asimismo, las corridas mostraron que los datos mejoran su ajuste en la medida en que la temperatura de la corrida

correspondiente se acerca a la temperatura utilizada para la obtención de los parámetros ASOG utilizados. Esto puede considerarse como una limitación temporal del método, dado que ya se realizan investigaciones que tienen por objetivo determinar la dependencia de los parámetros de grupo respecto a la temperatura, con lo cual la exactitud deberá mejorar considerablemente.

La obtención del número mínimo de platos teóricos por métodos gráficos mostró un ajuste confiable, para fines de una aproximación inicial, misma que resulta de gran utilidad puesto que si se desea continuar trabajado con un sistema dado y se desea mayor exactitud, se tiene ya una visión general de las condiciones que el sistema guarda con lo cual el esfuerzo necesario para realizar la tarea se reduce de manera considerable.

Resumen

R E S U M E N

En termodinámica el concepto de equilibrio, aquél estado en el cual las condiciones de un sistema se mantienen constantes al paso del tiempo, puede ser expresado en base a varios conceptos distintos, uno de los cuales es el de la fugacidad. Al utilizar las ecuaciones relacionadas con este parámetro, es necesaria la utilización de los coeficientes de actividad para el sistema en cuestión y estos parámetros pueden calcularse mediante la utilización de ecuaciones matemáticas varias o bien por métodos experimentales. Sin embargo, los métodos experimentales requieren tiempo y dinero y en la mayoría de los casos se requiere una aproximación confiable, rápida y de bajo costo. Por ello es que se está implementando alguna otra forma de obtener la información necesaria.

Uno de los métodos que pueden utilizarse es el método ASDG, el cual se encuentra basado en la teoría de grupos. Para probar la eficacia de dicho método, se realizó en el presente trabajo un programa en lenguaje basic que realizara todos los cálculos necesarios del sistema de ecuaciones y de igual manera obtuviera los valores de equilibrio líquido vapor para el sistema, los cuales a su vez serían comparados con los valores reportados por la literatura para el mismo sistema en condiciones similares.

De la comparación anteriormente mencionada se encontró que el método proporcionaba valores aceptables para los casos en que se trabaje en el rango de 10 a 90 % de concentración de líquido. Asimismo, se detectó una dependencia de los valores obtenidos para las fracciones de vapor con respecto a la temperatura, en virtud de que su ajuste mejora en la medida en que la temperatura de la corrida de trabajo se aproxima a la temperatura utilizada para la obtención de los parámetros de grupo del método ASDG, misma que se reporta en la literatura.

Finalmente, la aplicación de los valores proporcionados por el programa en la operación de destilación, paralelamente con los datos experimentales obtenidos de la literatura, mostró que el error detectado puede considerarse como aceptable y permitió concluir que la aplicación de dichos valores es útil como una forma de aproximación inicial para la resolución definitiva de un problema.

C o n c l u s i o n e s

C O N C L U S I O N E S

El análisis del trabajo presentado hasta el momento permite concluir lo siguiente:

- El método ASOG permite el cálculo de los coeficientes de actividad, lo cual a su vez es utilizado para la obtención de datos de equilibrio líquido-vapor.

- El ajuste de los valores obtenidos respecto de los valores experimentales a las mismas condiciones es deficiente cuando se trabaja en fracciones líquidas inferiores al 10% y fracciones superiores al 90 %, siendo bastante aceptable cuando el valor para la concentración de líquido se encuentra entre los límites mencionados.

- El método presenta dependencia de temperatura en el sentido de proporcionar mayor grado de ajuste en la medida en que la temperatura de la corrida de trabajo correspondiente sea cercana a la temperatura a la cual fueron obtenidos los parámetros de grupo del método ASOG.

- Como conclusión general puede establecerse que el método probado es eficiente en lo que se refiere a la obtención de valores de equilibrio líquido-vapor, siempre y cuando se tengan en cuenta las restricciones detectadas en el análisis de resultados. Asimismo, el método demostró ser adecuado en lo referente a la aplicación de los valores obtenidos en un cálculo natural de ingeniería química como lo

es la operación de destilación, por lo cual su utilización es recomendable para la elaboración de cálculos preliminares.

A p p e n d i c e s

A P É N D I C E A.I.-

PARÁMETROS PARA EL MÉTODO

A S O G

I.- SISTEMAS ALCOHOL-HIDROCARBURO-AGUA A 60 GRADOS
CENTÍGRADOS.

	CH	OH
CH	1.0000	0.305
OH	0.0147	1.000

II.- SISTEMAS METANOL-GLICEROL.

	CH	OH	GOH
CH	1.0000	0.305	0.353
OH	0.0147	1.000	1.095
GOH	0.0153	0.991	1.000

III.- SISTEMAS CETONA-ALCOHOL-AGUA

	CH	OH	C=O
CH	1.0000	0.305	1.333
OH	0.0147	1.000	0.668
C=O	0.0503	0.040	1.000

IV.- SISTEMAS ETER-ALCOHOL-AGUA A 60 GRADOS CENTÍGRADOS.

	CH	OH	-O-
CH	1.0000	0.305	1.711
OH	0.0147	1.000	0.355
-O-	0.3410	1.030	1.000

V.- SISTEMAS NITRILU ACUOSOS A 75 GRADOS CENTÍGRADOS

	CH	CH	CN	OH
CH	1.0000	0.8250	0.4450	0.3150
CH	1.1700	1.0000	0.0338	0.6000
CN	0.0470	0.3050	1.0000	0.2910
OH	0.0215	0.0250	0.5490	1.0000

VI.- SISTEMAS ESTER-ALCOHOL A 50 GRADOS CENTÍGRADOS

	CH	COO	OH
CH	1.0000	0.0720	0.3050
COO	1.0960	1.0000	1.1179
OH	0.0147	0.1650	1.0000

VII.- SISTEMAS ALCOHOL-AROMÁTICOS A 80 GRADOS CENTÍGRADOS.

	CH	CA	OH
CH	1.0000	0.7340	0.320
CA	1.2400	1.0000	0.534
OH	0.0245	0.0450	1.000

VIII.- SISTEMAS CON PRESENCIA DE CLORO

	CH	OH	CL	HBH
CH	1.0000	0.290	0.837	1.0000
OH	0.0070	1.000	0.011	0.0722
CL	1.1280	0.591	1.000	1.0000
HRH	1.0000	1.000	3.126	1.0000

IX.- PARAMETROS PARA FLUOROCOMPUESTOS

	CH	CF	O	HBH
CH	1.0000	0.4240	0.0015	1.0000
CF	1.5410	1.0000	0.6040	1.0000
O	0.4950	0.3340	1.0000	0.0015
HRH	1.0000	1.0000	3.1260	1.0000

X.- SISTEMAS AROMÁTICO-CETONA

	TEMP	CH	CA	C=O
CH	25	1.000	0.7050	0.8970
	60	1.000	0.7090	1.7300
	150	1.000	0.6600	2.1000
CA	25	1.240	1.0000	1.4180
	60	1.266	1.0000	1.5780
	150	1.520	1.0000	1.9000
C=O	25	0.048	0.1140	1.0000
	60	0.050	0.1620	1.0000
	150	0.075	0.2100	1.0000

A P É N D I C E A.II.-

CONSTANTES PARA LA DETERMINACIÓN DE PRESIÓN DE VAPOR DE
 COMPUESTOS Puros UTILIZANDO LA ECUACIÓN DE ANTOINE.

COMPUESTO	A	B	C
AGUA	8.0713	1730.63	233.43
ÁCIDO ACÉTICO	7.10807	1416.7	211.00
ANH. ACÉTICO	8.07117	2012.3	248.66
BENCENO (*)	11570.3	-11.48	50.396
AC. BENZOICO (*)	19426.5	-8.454	45.336
N-BUTANOL	9.06743	2295.1	254.29
o-CRESOL	6.97943	1497.4	170.00
CICLOHEXANO (*)	11042.7	-10.71	47.308
ETANOL	8.70884	1935.1	253.43
ETILBENCENO	6.95719	1424.26	213.21
AC. FÓRMICO	7.65708	1750.60	265.51
N-OCTANO	6.92374	1355.13	209.57
FENOL	8.23227	2251.78	239.83
ANH. FÍTALICO (*)	19270.9	-10.769	51.696
AC. PROPIONICO	8.32010	2140.48	252.88
TFRBUTANOL	7.36200	1180.90	180.48

ECUACIONES UTILIZADAS:

$$(*) \ln P \text{ (atm)} = \frac{-A}{RT} + \frac{B}{R} \ln T + C$$

para los demás compuestos:

$$\log P \text{ (mm Hg)} = A - \frac{B}{C+T \text{ (}^\circ\text{C)}}$$

Bibliografia

BIBLIOGRAFÍA

- 1.- Acree, William F. Thermodynamic Properties of Nonelectrolyte Solutions.
1984. Academic Press.
- 2.- Aguirre, C. Termodinámica del Equilibrio.
1971. Interamericana, 1a. Edición.
- 3.- Balzhiser, S. Termodinámica para Ingenieros
1977. Prentice-Hall Internacional.
- 4.- Chemical Engineering. Vol B2, No. 12, June 9, 1975.
- 5.- Sandler, Stanley I. Termodinámica en la Ingeniería
1981. Química.
Nva. Editorial Interamericana.
- 6.- Smith, Van Ness. Introducción a la Termodinámica en la Ingeniería Química.
1981. la Ingeniería Química.
Mc. Graw-Hill. Tercera Edición.

7.- Treybal, Robert E. Operaciones de Transferencia de
1980 Masa.

Mc.Graw-Hill, 2a. Edición.

8.- Derr, E.L. and Deal, C.H.

I. Chem. E. Symposium series 32,3:40 (1969)

in "International Symposium on Distillation 1969,
Brighton England Proceedings."

Inst. of Chem. Engr., London

9.- Ocon, J. Tojo, G. Problemas de Ingeniería Química

1980 Operaciones Básicas, Aguilar E.

Tercera Edición.