



**ESPE**  
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS  
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

**Modelo y simulación de una columna de destilación multicomponente discontinua con régimen de reflujo variable para mezcla de hidrocarburos utilizando métodos cortos en Matlab.**

Moreno Corrales, Alex Santiago

Departamento de Ciencias de la Energía y Mecánica

Carrera de Ingeniería en Petroquímica

Trabajo de titulación, previo a la obtención del título de Ingeniero en Petroquímica

Ph.D. Rodríguez Maecker, Roman Nicolay

30 de Agosto del 2021



## DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA

### CARRERA DE INGENIERÍA EN PETROQUÍMICA

#### Certificación

Certifico que el trabajo de titulación, **“Modelo y simulación de una columna de destilación multicomponente discontinua con régimen de reflujo variable para mezcla de hidrocarburos utilizando métodos cortos en Matlab ”** fue realizado por el señor **Moreno Corrales, Alex Santiago**, el cual ha sido revisado y analizado en su totalidad por la herramienta de verificación de similitud de contenido; por lo tanto cumple con los requisitos legales, teóricos, científicos, técnicos y metodológicos establecidos por la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE, razón por la cual me permito acreditar y autorizar para que lo sustente públicamente.

Latacunga, 30 Agosto de 2021



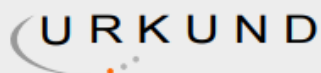
Firmado electrónicamente por:  
**ROMAN NICOLAY  
RODRIGUEZ  
MAECKER**

Dr. Rer. Nat., Ph.D Rodríguez Maecker, Roman Nicolay

DIRECTOR

C.C.: 1712082120

## Análisis urkund



## Urkund Analysis Result

**Analysed Document:** TESIS\_ALEX\_MORENO rev rnrm.docx (D111762872)  
**Submitted:** 8/27/2021 9:34:00 PM  
**Submitted By:** loretaibarra@yahoo.es  
**Significance:** 3 %

## Sources included in the report:

<https://www.studocu.com/en-au/document/instituto-tecnologico-de-minatitlan/destilacion-avanzada/lecture-notes/62029966023-documento-de-destilacion/7329189/view>  
[https://www.researchgate.net/publication/261835012\\_Metodo\\_Corto\\_para\\_la\\_Destilacion\\_Discontinua\\_Multicomponente\\_Con\\_siderando\\_una\\_Politica\\_de\\_Reflujo\\_Variable](https://www.researchgate.net/publication/261835012_Metodo_Corto_para_la_Destilacion_Discontinua_Multicomponente_Con_siderando_una_Politica_de_Reflujo_Variable)  
<https://repositorio.espe.edu.ec/bitstream/21000/14186/1/T-EPEL-IPE-0010.pdf>  
<https://docplayer.es/36250614-Universidad-simon-bolivar-decanato-de-estudios-profesionales-coordinacion-de-ingenieria-quimica.html>  
<https://revistas.uis.edu.co/index.php/revistaion/article/download/11852/11268/>  
<https://docplayer.es/94108654-Universidad-nacional-de-la-amazonia-peruana-facultad-de-ingenieria-quimica-tesis.html>

## Instances where selected sources appear:

15

ROMAN  
 NICOLAY  
 RODRIGUEZ  
 Z MAECKER

Firmado digitalmente por ROMAN NICOLAY RODRIGUEZ MAECKER  
 Fecha: 2021.08.27 15:27:14 -05'00'



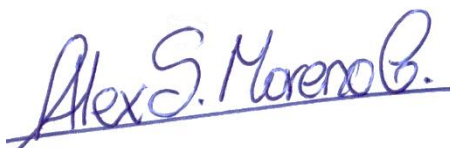
DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA

CARRERA DE INGENIERÍA EN PETROQUÍMICA

Responsabilidad de autoría

Yo, **Moreno Corrales , Alex Santiago**, con cédula de ciudadanía N° 0503325045, declaro que el contenido, ideas y criterios del trabajo de titulación: **“Modelo y simulación de una columna de destilación multicomponente discontinua con régimen de reflujo variable para mezcla de hidrocarburos utilizando métodos cortos en Matlab”** es de mi autoría y responsabilidad, cumpliendo con los requisitos legales, teóricos, científicos, técnicos, y metodológicos establecidos por la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE, respetando los derechos intelectuales de terceros y referenciando las citas bibliográficas.

Latacunga, 30 Agosto de 2021



Moreno Corrales, Alex Santiago

C.C.: 0503325045



**DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA**  
**CARRERA DE INGENIERÍA EN PETROQUÍMICA**

**Autorización de publicación**

Yo **Moreno Corrales, Alex Santiago**, con cédula de ciudadanía N° 0503325045, autorizo a la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE publicar el trabajo de titulación: **“Modelo y simulación de una columna de destilación multicomponente discontinua con régimen de reflujo variable para mezcla de hidrocarburos utilizando métodos cortos en Matlab”** en el Repositorio Institucional, cuyo contenido, ideas y criterios son de mi/nuestra responsabilidad.

Latacunga, 30 Agosto de 2021

Moreno Corrales, Alex Santiago

C.C.: 0503325045

### **Dedicatoria**

Este trabajo es dedicado a mis queridos padres Luz y Mario, por siempre brindarme el apoyo y su ejemplo durante toda mi vida, a quienes admiro por su gran esfuerzo y sacrificio diario, me incentivan a cumplir mis metas y sueños, son mi adoración en la vida. Así también, a mi querida hermana Mónica por siempre estar presente y brindarme su apoyo incondicional.

A mi Abuelo Sixto que siempre me brindó su apoyo, protección en todo momento.

Alex Moreno

## **Agradecimiento**

A Dios, por brindarme día a día la oportunidad de continuar mejorando y alcanzar mi meta profesional.

A toda mi familia, por todo su apoyo y confianza; a mi Padre Mario por mostrarme que todo trabajo, realizado con dedicación tiene su gran recompensa. A mi madre Luz por siempre enseñarme que toda gran meta involucra esfuerzo y sacrificio; a mi hermana Mónica por siempre apoyarme en cada momento de mi vida.

A mi Tutor, PhD. Roman Rodríguez por brindarme su apoyo, consejos y conocimiento, que me motivan siempre a crecer como persona y ser un mejor profesional.

A los docentes de la carrera de Ingeniería en Petroquímica, por brindarme apoyo, conocimiento y sabiduría desde el inicio de mi carrera universitaria, al motivarme a plantearme nuevas metas en mi vida profesional.

A todos mis compañeros y mis amigos Henry, Edwin, Karen, David, Cristian, William, Israel por todo el apoyo incondicional a lo largo de la carrera universitaria.

A toda mi familia por estar siempre pendiente y apoyarme en esta etapa de mi vida, mis más sinceros agradecimientos.

Alex Moreno

**Tabla de Contenidos**

<b>Carátula.....</b>	<b>1</b>
<b>Certificación .....</b>	<b>2</b>
<b>Análisis urkund .....</b>	<b>3</b>
<b>Responsabilidad de autoría.....</b>	<b>4</b>
<b>Autorización de publicación.....</b>	<b>5</b>
<b>Dedicatoria.....</b>	<b>6</b>
<b>Agradecimiento .....</b>	<b>7</b>
<b>Tabla de Contenidos .....</b>	<b>8</b>
<b>Índice de tablas .....</b>	<b>13</b>
<b>Índice de figuras .....</b>	<b>14</b>
<b>Índice de ecuaciones.....</b>	<b>16</b>
<b>Abreviaturas .....</b>	<b>18</b>
<b>Resumen.....</b>	<b>19</b>
<b>Abstract.....</b>	<b>20</b>
<b>Generalidades.....</b>	<b>21</b>
<b>Introducción .....</b>	<b>21</b>
<b>Planteamiento del problema .....</b>	<b>24</b>
<b>Justificación e Importancia.....</b>	<b>24</b>
<b>Objetivos .....</b>	<b>25</b>
<b><i>Objetivo general.....</i></b>	<b>25</b>
<b><i>Objetivo específico.....</i></b>	<b>26</b>
<b>Variables de Investigación .....</b>	<b>26</b>
<b><i>Variables Independientes .....</i></b>	<b>26</b>
<b><i>Variables Dependientes .....</i></b>	<b>26</b>
<b>Fundamentación teórica .....</b>	<b>27</b>



Destilación.....	27
<i>Destilación continua</i> .....	27
<i>Destilación Batch</i> .....	29
Tipos de destilación.....	30
<i>Destilación simple Atmosférica</i> .....	30
<i>Destilación a Presión reducida</i> .....	30
<i>Destilación Fraccionada</i> .....	30
<i>Destilación por arrastre de vapor</i> .....	30
Petróleo y sus derivados.....	31
<i>Naftas</i> .....	31
Equilibrios liquido- Vapor.....	33
<i>Ley de Henry</i> .....	34
<i>Ley de Raoult</i> .....	35
Ecuaciones de estado.....	37
Ecuaciones de estado cubicas .....	37
<i>Ecuación de Van der Walls</i> .....	37
<i>Ecuación de Redlich-Kwong</i> .....	39
<i>Ecuación de Soave- Redlich-Kwong</i> .....	40
<i>Ecuación de Peng Robinson</i> .....	41
Métodos Rigurosos .....	42
Métodos Aproximados.....	42
<i>Método McCabe-Thiele</i> .....	42
<i>Ecuación de Smoker</i> .....	43

<b>Método Fenske-Underwood-Gilliland(FUG) o Shortcut .....</b>	<b>43</b>
<i>Ecuación de Fenske.....</i>	<b>43</b>
<i>Ecuación de Underwood .....</i>	<b>45</b>
<i>Ecuación de Gilliland.....</i>	<b>46</b>
<i>Ecuación de balance Global para una columna de destilación discontinua .....</i>	<b>46</b>
<i>Ecuación de balance por componentes. ....</i>	<b>47</b>
Régimen de reflujo .....	<b>49</b>
Metodología de desarrollo de proyecto .....	<b>50</b>
Datos teóricos.....	<b>50</b>
<i>Selección de mezcla.....</i>	<b>50</b>
Algoritmo para el método cortó para destilación discontinua .....	<b>53</b>
<i>Suposiciones a considerar para el método shortcut.....</i>	<b>54</b>
<i>Cálculo del número mínimo de etapas.....</i>	<b>54</b>
<i>Correlaciones de Gilliland y Eduljee .....</i>	<b>56</b>
<i>Composición del destilado del domo.....</i>	<b>57</b>
<i>Determinación del reflujo mínimo <math>R_{min}</math> .....</i>	<b>57</b>
<i>Determinación del reflujo <math>R</math>.....</i>	<b>58</b>
<i>Concentración del reboiler <math>B</math> .....</i>	<b>58</b>
Solución numérica del modelo matemático.....	<b>58</b>
<i>Simulación computacional .....</i>	<b>58</b>
<i>Simulación del proceso de destilación Batch.....</i>	<b>59</b>
<i>Selección de componentes.....</i>	<b>59</b>

<i>Selección del paquete termodinámico</i> .....	60
<i>Selección del sistema de Unidades</i> .....	60
<i>Corriente de alimentación</i> .....	61
<i>Temperatura de ebullición</i> .....	61
<i>Condiciones de entrada en la alimentación</i> .....	61
<i>Columna de destilación</i> .....	62
<i>Selección del número de plato y la presión del condensador</i> .....	63
<i>Sección del reflujo, tiempo y flujo de vapor</i> .....	63
Resultados y discusión .....	65
Composición de la corriente de Alimentación .....	65
Modelado matemático.....	65
Temperatura de ebullición .....	68
Cálculos de presión de vapor. ....	69
<i>Volatilidad Relativa</i> .....	69
Simulaciones en Matlab.....	71
<i>Remanente de los fondos</i> .....	71
<i>Relación de reflujo</i> .....	72
<i>Composición de los fondos</i> .....	73
<i>Composición del destilado</i> .....	75
<i>Simulación del proceso de destilación Batch</i> .....	78
Comparación de resultados .....	78
<i>Remanentes de los fondos</i> .....	79
<i>Comparación de Componente en el destilado</i> .....	80

<i>Comparación del del flujo de destilado .....</i>	<b>81</b>
<i>Comparación de resultados a flujo de vapor constante.....</i>	<b>83</b>
<b>Conclusiones y recomendaciones.....</b>	<b>85</b>
<b>Conclusiones .....</b>	<b>85</b>
<b>Recomendaciones.....</b>	<b>86</b>
<b>Bibliografía .....</b>	<b>87</b>
<b>Anexos .....</b>	<b>90</b>

**Índice de tablas**

<b>Tabla 1.</b> <i>Componentes de mezcla de Nafta de Refinería de Esmeraldas.</i> .....	51
<b>Tabla 2.</b> <i>Coeficientes de Antoine para cada componente parte I</i> .....	52
<b>Tabla 3.</b> <i>Coeficientes de Antoine para cada componente parte II</i> .....	52
<b>Tabla 4.</b> <i>Composición de Alimentación.</i> .....	65
<b>Tabla 5.</b> <i>Presiones de Vapor.</i> .....	69
<b>Tabla 6.</b> <i>Volatilidades Relativas</i> .....	70
<b>Tabla 7.</b> <i>Condiciones de entrada para el estudio del reflujo variable</i> .....	70
<b>Tabla 8.</b> <i>Parámetros calculados a partir del modelamiento</i> .....	77

## Índice de figuras

<b>Figura 1.</b> <i>Equipo Destinorm</i> .....	28
<b>Figura 2.</b> <i>Equipo de destilación Batch</i> .....	29
<b>Figura 3.</b> <i>Petróleo y sus fracciones</i> .....	32
<b>Figura 4.</b> <i>Caracterización de Nafta liviana por cromatografía de gases</i> .....	33
<b>Figura 5.</b> <i>Equilibrio Líquido-Vapor de una mezcla</i> .....	34
<b>Figura 6.</b> <i>Diagrama Presión vs Temperatura</i> .....	36
<b>Figura 7.</b> <i>Isotermas</i> .....	39
<b>Figura 8.</b> <i>Algoritmo Shortcut para Destilación Batch</i> .....	53
<b>Figura 9.</b> <i>Programación de los componentes</i> .....	59
<b>Figura 10.</b> <i>Selección de componentes</i> .....	59
<b>Figura 11.</b> <i>Selección del Paquete Termodinámico</i> .....	60
<b>Figura 12.</b> <i>Selección de Unidades</i> .....	60
<b>Figura 13.</b> <i>Composición de la corriente de Alimentación</i> .....	61
<b>Figura 14.</b> <i>Condiciones de entrada</i> .....	62
<b>Figura 15.</b> <i>Columna de destilación Batch</i> .....	62
<b>Figura 16.</b> <i>Presión del condensador</i> .....	63
<b>Figura 17.</b> <i>Selección del reflujo, tiempo, flujo de vapor.</i> .....	64
<b>Figura 18.</b> <i>Temperatura de Ebullición</i> .....	68
<b>Figura 19.</b> <i>Remanente de Fondos</i> .....	71
<b>Figura 20.</b> <i>Variación del Destilado</i> .....	72

<b>Figura 21.</b> <i>Variación de relación de Reflujo</i> .....	73
<b>Figura 22.</b> <i>Variación de la composición molar de los Fondos NP=30.</i> .....	74
<b>Figura 23.</b> <i>Composición de Fondos NP=40.</i> .....	74
<b>Figura 24.</b> <i>Composición de Fondos NP=50.</i> .....	75
<b>Figura 25.</b> <i>Composición Molar del destilado a NP=30.</i> .....	76
<b>Figura 26.</b> <i>Composición del destilado a NP=40.</i> .....	76
<b>Figura 27.</b> <i>Composición del destilado a NP=50.</i> .....	77
<b>Figura 28.</b> <i>Condiciones de salida de la columna Batch.</i> .....	78
<b>Figura 29.</b> <i>Variación del Remanente de los fondos para NP=30.</i> .....	79
<b>Figura 30.</b> <i>Variación del Remanente de los fondos para NP=40 .</i> .....	80
<b>Figura 31.</b> <i>Comparación del componente lk en destilado NP=30.</i> .....	80
<b>Figura 32.</b> <i>Comparación del componente lk en destilado NP=40.</i> .....	81
<b>Figura 33.</b> <i>Comparación del flujo de destilado a NP=30.</i> .....	81
<b>Figura 34.</b> <i>Comparación del destilado a NP=40.</i> .....	82
<b>Figura 35.</b> <i>Datos de comparaciones.</i> .....	83
<b>Figura 36.</b> <i>Composición en los fondos componente lk.</i> .....	83
<b>Figura 37.</b> <i>Remanente de los fondos a flujo de vapor:</i> .....	84
<b>Figura 38.</b> <i>Flujo de destilado.</i> .....	84

## Índice de ecuaciones

<b>Ecuación 1.</b> <i>Ley de Henry</i> .....	34
<b>Ecuación 2.</b> <i>Ley de Raoult</i> .....	35
<b>Ecuación 3.</b> <i>Volatilidad Relativa</i> .....	37
<b>Ecuación 4.</b> <i>Ecuación de Van der Walls</i> .....	38
<b>Ecuación 5.</b> <i>Ecuación de Redlich-Kwong</i> .....	40
<b>Ecuación 6.</b> <i>Ecuación de Soave- Redlich-Kwong</i> .....	40
<b>Ecuación 7.</b> <i>Ecuación de Peng Robinson</i> .....	41
<b>Ecuación 8.</b> <i>Ecuación de Fenske</i> .....	43
<b>Ecuación 9.</b> <i>Composición del Destilado</i> .....	44
<b>Ecuación 10.</b> <i>Composición del componente de referencia en el destilado</i> .....	44
<b>Ecuación 11.</b> <i>Ecuación de Underwood clase I</i> .....	45
<b>Ecuación 12.</b> <i>Ecuaciones de Underwood clase II</i> .....	45
<b>Ecuación 13.</b> <i>Ecuación de Gilliland</i> .....	46
<b>Ecuación 14.</b> <i>Ecuación de balance global para destilación discontinua</i> .....	47
<b>Ecuación 15.</b> <i>Balance de masa en el Top de la columna</i> .....	47
<b>Ecuación 16.</b> <i>Ecuación de balance por componentes</i> .....	48
<b>Ecuación 17.</b> <i>Derivada parcial ecuación de balance por especies</i> .....	48
<b>Ecuación 18.</b> <i>Variación de composición(fondos) con respecto al tiempo</i> .....	49
<b>Ecuación 19.</b> <i>Ecuación de Antoine</i> .....	51
<b>Ecuación 20.</b> <i>Determinación del reflujo</i> .....	54



<b>Ecuación 21.</b> <i>Función para determinación del número mínimo de etapas</i> .....	55
<b>Ecuación 22.</b> <i>Derivada de la función, cálculo de número mínimo de etapas</i> .....	55
<b>Ecuación 23.</b> <i>Número mínimo de etapas</i> .....	56
<b>Ecuación 24.</b> <i>Ecuación de Eduljee</i> .....	56
<b>Ecuación 25.</b> <i>Correlación de Eduljee</i> .....	56
<b>Ecuación 26.</b> <i>Cálculo de Reflujo mínimo</i> .....	57
<b>Ecuación 27.</b> <i>Discretización de la ecuación de balance global</i> .....	66
<b>Ecuación 28.</b> <i>Ecuación para determinación del flujo molar en el fondo</i> .....	67
<b>Ecuación 29.</b> <i>Balance parcial por componente i</i> .....	68

**Abreviaturas**

R	Reflujo.
D	Destilado(Kmol).
B	Remanente de los Fondos (Kmol).
Rmin	Reflujo mínimo.
Nmin	Número mínimo de etapas.
lk	Componente clave ligero.
$\Delta T$	Variación de tiempo.
XB(i)	Composición de los fondos.
XD(i)	Composición del destilado.
$\alpha$	Volatilidad relativa.
k	Componente clave pesado.

## Resumen

El presente trabajo analiza el comportamiento de una mezcla multicomponente en un destilador Batch ideal. Las condiciones de operación y modelado matemático de las ecuaciones se resuelven a partir de métodos cortos mediante las ecuaciones de Fenske-Underwood y Gilliland, basados en el aporte de (Sundaram & Evans, 1993). Para el desarrollo de este trabajo, se consideró las siguientes condiciones de operación de la columna: mezcla multicomponente utilizada es tratada como mezcla ideal, temperatura de ebullición de la mezcla, volatilidades relativas constantes, flujo constante de vapor y un tiempo de operación de dos horas. La mezcla seleccionada para el desarrollo de este trabajo es el corte de nafta liviana proveniente de la Refinería Estatal de Esmeraldas. Las propiedades de cada componente presente en la mezcla son determinadas a partir de revisión bibliográfica. Las ecuaciones modeladas son sometidas a un proceso interactivo que determina el número mínimo de etapas en función de la variación de reflujo y la variación de tiempo, a las condiciones de operación establecidas en estudios anteriores considerados como referencia. El algoritmo de cálculo interactivo del número mínimo de etapas fue elaborado en la plataforma Matlab, mediante lenguaje de programación y evaluado para un determinado número de platos.

### **PALABRAS CLAVE:**

- **DESTILACIÓN MULTICOMPONENTE**
- **REFLUJO VARIABLE**
- **VOLATILIDAD RELATIVA**
- **MODELOS MATEMÁTICOS**

### **Abstract**

The present work analyzes the behavior of a multicomponent mixture in an ideal batch still. The operating conditions and mathematical modeling of the equations are solved from short methods using the Fenske-Underwood and Gilliland equations, based on the contribution of (Sundaram & Evans, 1993). For the development of this work, the following operating conditions of the column are considered: the multicomponent mixture used is treated as an ideal mixture, boiling temperature of the mixture, constant relative volatilities, constant steam flow and an operating time of two hours. . The mixture selected for the development of this work is the cut of light naphtha from the Esmeraldas State Refinery. The properties of each component present in the mixture are determined from a bibliographic review. The modeled equations are subjected to an interactive process that determines the minimum number of stages as a function of the reflux variation and the time variation, at the operating conditions established in previous studies considered as a reference. The algorithm for the interactive calculation of the minimum number of stages was developed in the Matlab platform, a programming language, and evaluated using a certain number of plates.

### **KEYWORDS:**

- **MULTI-COMPONENT DISTILLATION**
- **VARIABLE REFLUX**
- **RELATIVE VOLATILITY**
- **MATHEMATICAL MODELS**

## Capítulo I

### 1. Generalidades

#### 1.1. Introducción

La destilación es una importante operación unitaria en la industria química, fundamentada en la separación de mezclas líquidas binarias o multicomponentes; los niveles de separación de mezclas dependen de factores como: propiedades de mezcla, características de la columna (Krell, 1982). Varias herramientas de diseño se construyen a partir de métodos: gráfico, corto y riguroso, establecidos por ecuaciones de balance de materia y energía, al predecir la dinámica, comportamiento y condiciones de frontera del proceso (García García & González Ponce, 2014).

Un procedimiento corto presentado por Sundaram y Evans (1993) para simular una operación de destilación por lotes, se fundamenta en las ecuaciones de Fenske-Underwood-Gilliland para una columna de destilación Batch; el modelo planteado de la columna por lotes se asemeja a una sección rectificadora, con incremento variable de tiempo y un proceso de integración explícita de primer orden con las resoluciones de las ecuaciones FUG en cada paso de tiempo. Los estudios establecen comparaciones gráficas entre las composiciones instantáneas de líquido y vapor en función de la alimentación inicial que destila, con una gran concordancia de datos entre el modelo establecido y la simulación.

La síntesis de destilación por lotes presentado por Sundaran y Evans (1993), permite separar una corriente de alimentación suministrada en varios productos con una sola columna, el método propone una superestructura con todas las combinaciones posibles incorporadas en su interior, al realizar la separación requerida con programación no lineal y una metodología de optimización estándar. Con base en los resultados, al considerar que la superestructura se resuelve a partir

de las ecuaciones de balance de materia, balances parciales y restricciones, se obtuvo valores óptimos en cortes y la relación de reflujo.

Un método corto estudiado por Cerda y Westerberg (1981) para columnas de destilación complejas con reflujo mínimo, es un método que determina: las condiciones mínimas de reflujo, número de etapas y la ubicación del plato de alimentación, para columnas ordinarias y térmicamente acopladas; al considerar, componentes clave no adyacentes, por estimación del reflujo mínimo aproximado con métodos de Underwood-Colburn. Los resultados obtenidos permiten establecer el reflujo de una forma sencilla, con precisión y pocas interacciones.

Un modelo corto presentado por Gadalla y colaboradores (2003) para el diseño retrofit de columnas de destilación, se enfoca en un modelo de modernización de columnas de destilación ya existentes, mejorando su rendimiento con combinaciones de modelos de integración de calor. Estos modelos se basan en el método Underwood modificado, correlaciones de Gilliland y Kirkbride, la ecuación de Fenske y balances de materia. El estudio determina un modelo que calcula: caudales, temperatura, composiciones del producto y cambios de volatilidad relativa, superando limitaciones de los otros modelos cortos establecidos.

Para la destilación multicomponente presentado por Domínguez y colaboradores (2011) se desarrolló una interfaz gráfica utilizando métodos cortos, las consideraciones para el desarrollo del proceso fueron: simulación en estado estacionario, proceso de operación a reflujo permanente y módulos empleados por el método FUGK. Los resultados que se obtuvieron de la interfaz gráfica facilitan la construcción de diseños preliminares de las torres de destilación mediante el cálculo de parámetros principales como: número de platos teóricos, composiciones en el destilado y los fondos, plato de alimentación.

Un estudio desarrollado por Narváez García y colaboradores (2013) de un “método corto para una destilación Batch multicomponente, al considerar una política de reflujo variable”, utilizó componentes clase I, clase II y condiciones como: volatilidades relativas constantes, flujo constante, acumulación despreciable de vapor y líquido en cada plato; con el empleo del método FUG. Este estudio determina las etapas teóricas, reflujo mínimo, la cantidad de destilado, fondos y su composición.

El estudio presentado por Narváez García y colaboradores (2014) sobre la aplicación de tres índices de calidad o rendimiento (factor de capacidad de Luyben, costos anuales totales y ganancia anual), con el diseño de una columna de destilación por lotes que trabaja a reflujo variable mediante el método abreviado de Fenske-Underwood-Gilliland, para cuatro componentes (benceno, tolueno, etilbenceno y orto-xileno) que se separan y purifican a una fracción molar de 0,97 o superior. En este estudio analiza el rendimiento del sistema al utilizar columnas de destilación con 10, 20, 30, 40 y 50 etapas teóricas con un flujo de vapor de ebullición establecido en 100 kmol / h. Los resultados de este estudio confirman que requiere una relación de reflujo cercana al mínimo, y una ganancia anual de índice de mejor calidad, para el caso de reflujo variable fue la columna con 50 etapas.

Para una columna de destilación por lotes se presentó un estudio comparativo elaborado por Narváez García y colaboradores (2017), mediante los métodos desarrollados por (Narvaéz García, Zabala Loría, Rocha Uribe, & Rubio Atoche, 2013) y Diwerkar. Los resultados de ambos métodos se comparan para su validación con los resultados utilizando el método riguroso presentado por Domenech y Enjalbert. Sin presentar diferencias significativas establecidas por la desviación máxima calculada que fue inferior al 3% para ambos métodos cortos.

## **1.2. Planteamiento del problema**

En la actualidad el diseño de procesos desempeña un conjunto de alternativas para el desarrollo e innovación en áreas que involucran una optimización, ingeniería, información e intensificación. Las columnas de destilación como operación unitaria fundamental en la separación de hidrocarburos provenientes del petróleo, presenta una necesidad de establecer un conjunto de parámetros y condiciones: como un diseño preliminar de un equipo, a partir de métodos y requerimientos de la industria de refinación (Perdomo Hurtado, 2007).

Según (Narvaéz García, Zabala Loría, Rocha Uribe, & Rubio Atoche, 2013), Los métodos basados en modelos matemáticos como: método gráfico, corto o riguroso, establecidos para las columnas de destilación, se caracterizan por presentar balances de materia y energía; el problema recae en el método riguroso debido al modelo complejo de diseño de plato, y la resolución por estrategias numéricas, con una formulación de múltiples diseños de columnas de destilación que no son parte del diseño final (Jiménez Gutierrez, 2003).

## **1.3. Justificación e Importancia**

Según (Semplades, 2017), El plan nacional de buen vivir señala un cambio en la sociedad ecuatoriana del conocimiento, se basa en una economía de bienes infinitos mediante el desarrollo tecnológico, innovación y su inserción en la matriz productiva, a través de la generación de entornos, fortalecimiento de cadenas productivas, potenciamiento de las industrias básicas como la industria petroquímica, al generar nuevas tecnologías incorporadas al desarrollo en procesos de producción eficiente y generación de conocimientos.

En el plan toda una vida, las nuevas tecnologías que permiten el desarrollo de procesos, que precisan profesionales con conocimientos de software de



simulación, al posibilitar análisis, evaluaciones de comportamiento y desempeño con resultados satisfactorios para su posterior aplicación en la industria; además de conocimientos que faculten la generación de modelos matemáticos y algoritmos para su posterior simulación (Semplades, [www.gobiernoelectronico.gob.ec](http://www.gobiernoelectronico.gob.ec), 2017).

El método riguroso es uno de los métodos más complejos, está compuesto por un conjunto de ecuaciones algebraicas no lineales relacionadas de forma directa en parámetros como: equilibrio, entalpía y balances de materia; que al ser trasladadas a un ambiente de modelado y simulación por computadora requieren un alto costo computacional, excesivos tiempos de resolución por la capacidad de procesamiento de cómputo; en comparación con los métodos aproximados, requieren menores parámetros, ecuaciones algebraicas y costos computacionales bajos. Los resultados pueden ser considerados como datos iniciales para los procesos de optimización (Sánchez Mares, 2006).

Este trabajo de titulación, pretende analizar el comportamiento de una columna de destilación multicomponente discontinua de una mezcla de hidrocarburos a través de los métodos cortos, mediante el modelamiento matemático de las ecuaciones y la simulación computacional, al considerar un régimen de reflujo variable.

## **1.4. Objetivos**

### **1.4.1 Objetivo general**

Elaborar un programa de simulación de una columna de destilación multicomponente discontinua considerando un régimen de reflujo variable utilizando métodos cortos en Matlab.

### **1.4.2 Objetivo específico**

- Determinar las ecuaciones que permiten representar una columna de destilación Batch con régimen de reflujo variable para una mezcla multicomponente ideal por los métodos cortos.
- Simular el algoritmo de la columna de destilación discontinua por el método corto mediante programación en Matlab.
- Evaluar los datos obtenidos de las composiciones del destilado y los fondos de la columna de destilación.
- Comparar los resultados obtenidos del proceso de destilación propuesto con las variables de salida de un simulador comercial.

## **1.5. Variables de Investigación**

### **1.5.1 Variables Independientes**

Tiempo de Operación

### **1.5.2 Variables Dependientes**

Flujo Remanente

Composición en el destilado y fondos

Reflujo

Número mínimo de etapas

Reflujo mínimo.

## Capítulo II

### 2. Fundamentación teórica

#### 2.1. Destilación

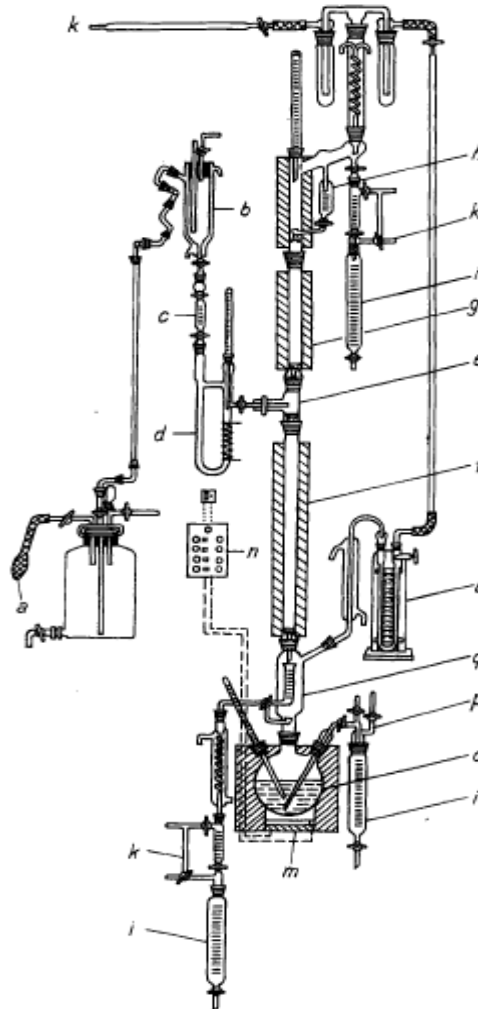
La destilación es un método que permite separar componentes de una mezcla y la distribución de la sustancia entre las fases líquida y gaseosa o en ambas fases; una correcta manipulación de las fases a través de vaporizaciones y condensaciones posibilita una separación completa de los componentes en sus estados puros (Treybal, 1981).

##### 2.1.1 Destilación continua

La destilación continua es un proceso de separación de mezclas que se produce de forma ininterrumpida, su materia prima al inicio es precalentada hasta un determinado valor que favorece la separación de los componentes de mezcla por el destilado y los fondos, al abandonar el equipo de forma continua (Krell, 1982).

Presenta las siguientes ventajas:

- Tratamiento térmico agresivo.
- Mayor rendimiento.
- Permite la recuperación de disolventes.
- Consumo energético mínimo.
- Obtener una composición específica en los productos.

**Figura 1.***Equipo Destinorm*

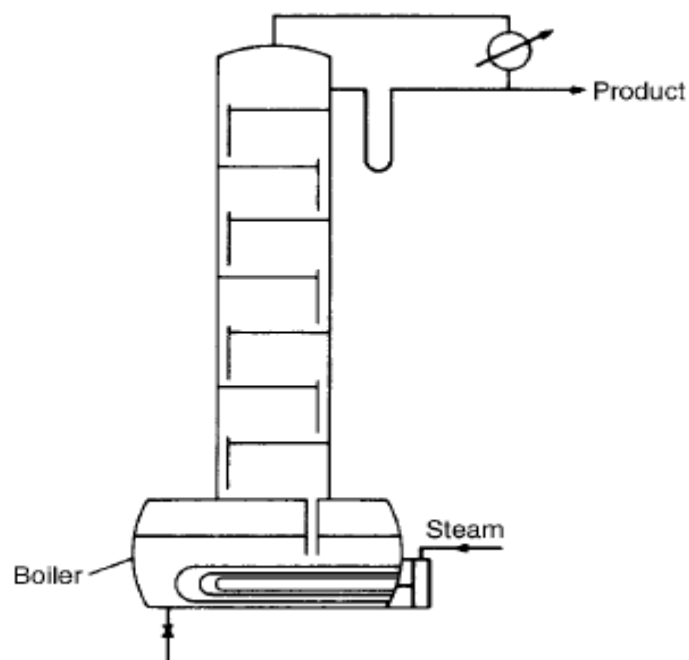
*Nota:* Equipo Destinorm para destilación continua al vacío. a = dispositivo de llenado, b = recipiente de alimentación calentado, c = pipeta graduada, d = tubo de calentamiento para la alimentación, e = tubo de conexión con entrada de alimentación, f = parte inferior de la columna, g = bobina, h = cabezal de la columna con pipeta graduada, i = pipeta graduada, k = conexión de vacío. l = manómetro de contacto, m = calentador de matraces, n = tablero de distribución, o = fondo, p = punto de muestreo: q = medidor de reflujos de fondos. Tomado de (Krell, 1982)

### 2.1.2 Destilación Batch

La destilación Batch o discontinua es una separación de mezclas que permite la obtención de componentes puros mediante el aumento continuo de la relación de reflujo, al mantener constante la calidad del producto en el destilado. La destilación discontinua permite manejar cantidades pequeñas de mezclas orgánicas multicomponentes y así obtener grados razonables de pureza, por ejemplo, recuperación de componentes valiosos (Richardson, Harker, & Backhurst, 2002).

#### Figura 2.

*Equipo de destilación Batch*



*Nota:* Columna de destilación Batch. Tomado de (Richardson, Harker, & Backhurst, 2002)

## **2.2. Tipos de destilación**

### **2.2.1 Destilación simple Atmosférica**

La destilación atmosférica es un método de separación de componentes presentes en una mezcla, con una presión de operación similar a la presión atmosférica. Esta separación es posible para componentes donde la diferencia de temperatura de ebullición y volatilidad relativa no es adyacente (Angurell, y otros, 2021).

### **2.2.2 Destilación a Presión reducida**

La destilación a presión reducida o destilación al vacío es un proceso de separación para mezclas líquidas que no pueden ser divididas por destilación atmosférica o sufren descomposición térmica antes de su punto de ebullición normal. Este proceso utiliza una bomba de vacío que permite destilar componentes de mezcla a una temperatura inferior a la temperatura de ebullición (Angurell, y otros, 2021).

### **2.2.3 Destilación Fraccionada**

La destilación fraccionada es un método de separación de mezclas líquidas cuyos puntos de ebullición y volatilidades relativas son adyacentes, mediante un enriquecimiento del componente más volátil a través de una columna fraccionadora. Este proceso se desarrolla a una presión atmosférica y al vacío (Angurell, y otros, 2021).

### **2.2.4 Destilación por arrastre de vapor**

La destilación por arrastre de vapor es un proceso que facilita la purificación de compuestos que son solubles en agua, poco volátiles. La mezcla a separar es posible recuperarla con la adición de agua en exceso y por destilación separar los

compuestos no volátiles y solubles en agua, del compuesto orgánico recolectado insoluble en agua (Angurell, y otros, 2021).

## **2.3. Petróleo y sus derivados**

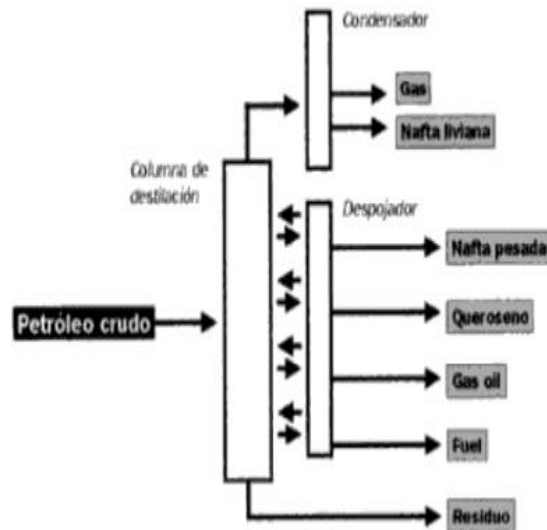
### **2.3.1 Naftas**

El petróleo es una mezcla de hidrocarburos que en su interior contiene una fracción líquida (crudo), fracciones sólidas (bitumen) y la fracción gaseosa conocida como gas natural, además de componentes que contienen en su estructura azufre, oxígeno, nitrógeno, y componentes químicos con la presencia de compuestos metálicos como: Vanadio, Níquel, Hierro, cobre. El petróleo extraído antes de fragmentarlo debe ser sometido a procesos previos de desalinización, que elimine soluciones salinas ligadas; y evitar destrucción en las instalaciones como: tuberías, calentadores y columnas de destilación (Speight, 2001).

La fragmentación del petróleo desalinizado se produce por columnas de destilación al obtener cortes o fracciones de petróleo como: gas, nafta liviana, nafta pesada, querosene, gas Oil, fuel y residuo, que difieren unas de otras en función de sus propiedades físicas como: Temperatura de ebullición, viscosidad; algunas de esas fracciones obtenidas son utilizadas como combustibles en la industria (Borgna, Di Cosino, & Fígoli, 2001).

### Figura 3.

#### *Petróleo y sus fracciones*



*Nota:* Componentes del petróleo obtenidos por destilación (Borgna, Di Cosino, & Fígoli, 2001).

La nafta liviana es uno de los componentes provenientes del proceso de destilación del crudo, se extrae en la región ubicada en la parte superior de la columna de destilación (domo); esta fracción de petróleo está compuesta principalmente de componentes livianos como gases y combustibles líquidos; debido a su alto contenido de elementos parafínicos de tipo lineal, presentan un bajo índice de octano y menor capacidad calorífica. Mediante procesos de refinación y reformado, una nafta incrementa sus propiedades al modificar su estructura.

En un estudio elaborado por (Sinche A., 2012), establece una caracterización de un corte de nafta liviana, por medio de cromatografía de gases, proveniente de la Refinería Estatal de Esmeraldas; al determinar la presencia de los siguientes compuestos que se muestran a continuación:



**Figura 4.**

*Caracterización de Nafta liviana por cromatografía de gases*

Time	Index	Component	Mass %	Vol %	Mol %	Peak Area
3.893	301.4	propane	0.1076	0.1402	0.1884	0.935
4.205	355.6	i-butane	0.5209	0.6098	0.6918	4.578
4.473	398.9	n-butane	9.3676	10.5572	12.4418	82.325
4.609	409.7	2,2-dimethylpropane	0.0569	0.0628	0.0609	0.504
5.455	467.3	i-pentane	19.4615	20.4885	20.8231	172.220
5.985	498.9	n-pentane	21.2777	22.1645	22.7664	188.293
6.990	530.2	2,2-dimethylbutane	0.2415	0.2427	0.2163	2.146
8.048	558.1	cyclopentane	2.2320	1.9533	2.4568	20.316
8.279	563.7	2-methylpentane	8.8342	8.8234	7.9138	78.488
8.963	579.5	3-methylpentane	5.5794	5.4786	4.9981	49.571
9.905	599.3	n-hexane	8.5375	8.4456	7.6480	75.852
11.549	621.4	2,2-dimethylpentane	0.0835	0.0809	0.0644	0.745
11.718	623.5	methylcyclopentane	6.0281	5.2526	5.5294	54.868
12.023	627.1	2,4-dimethylpentane	0.3526	0.3419	0.2717	3.145
13.675	645.5	benzene	0.7012	0.5204	0.6930	6.874
14.594	654.7	cyclohexane	2.0514	1.7189	1.8817	18.673
15.620	664.4	2-methylhexane	1.5322	1.4728	1.1804	13.668
15.790	666.0	2,3-dimethylpentane	0.7966	0.7476	0.6137	7.106
16.076	668.5	1,1-dimethylcyclopentane	0.2860	0.2473	0.2249	2.603
16.632	673.4	3-methylhexane	2.0195	1.9172	1.5558	18.014
17.368	679.5	1,3-dimethylcyclopentane	1.1578	1.0140	0.9103	10.538
17.722	682.4	1,3-dimethylcyclopentane	1.0300	0.8972	0.8098	9.375
18.078	685.3	1,2-dimethylcyclopentane	2.2581	1.9603	1.7754	20.554
20.002	699.7	n-heptane	2.3666	2.2579	1.8233	21.111
23.041	719.8	methylcyclohexane	2.1874	1.8544	1.7198	19.910
23.703	723.9	1,1,3-trimethylcyclopentane	0.1641	0.1431	0.1129	1.494
25.294	733.1	ethylcyclopentane	0.2943	0.2505	0.2314	2.679
30.181	758.3	toluene	0.4737	0.3564	0.3969	4.593

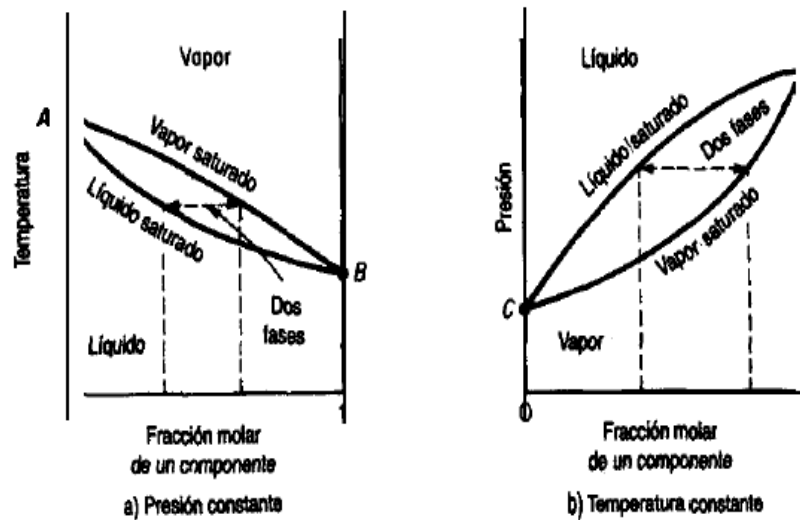
*Nota:* Caracterización de Nafta liviana proveniente de la Refinería de Esmeraldas por cromatografía de gases. Tomado de (Sinche A., 2012).

## 2.4. Equilibrios líquido- Vapor

Una mezcla de dos fases vapor - líquido está en equilibrio cuando un componente de una fase está en equilibrio con el mismo componente en la otra fase, depende de parámetros como: presión y composición de mezcla. En la Figura 5, los componentes puros ejercen sus respectivas presiones de vapor a la temperatura de equilibrio, si al variar la composición global de mezcla, existe dos fases, en consecuencia, existe una composición diferente para el mismo componente en sus pares de puntos (Himmelblau, 1997).

Figura 5.

Equilibrio Líquido-Vapor de una mezcla



Nota: Equilibrios líquido- vapor para una mezcla binaria con respecto a la presión y la temperatura. Tomado de (Himmelblau, 1997).

### 2.4.1 Ley de Henry

Es la relación entre la fracción molar de un componente en la fase vapor y fracción molar del mismo componente presente en la fase líquida (Himmelblau, 1997).

#### Ecuación 1. Ley de Henry

$$p_i = H_i x_i$$

Donde:

$p_i$  = Presión en la fase gaseosa del componente diluido.

$H_f$  = Constante de Henry.

$x_i$  = fracción molar del componente en la fase líquida

$$y_i = \frac{p_i}{P_{total}} = \frac{H_i x_i}{P_{total}}$$

Donde:

$y_i$  = Fracción molar del componente en la fase gaseosa.

$P_{total}$  = Presión Total.

### 2.4.2 Ley de Raoult

La ley de Raoult se usa para componentes donde la fracción molar se aproxima a 1, y los hidrocarburos lineales tienen similitud en su naturaleza química (Himmelblau, 1997). Si la mezcla de componentes sigue la ley de Raoult, entonces la presión de vapor de una mezcla se calcula gráficamente a partir del conocimiento de la presión de vapor de los dos componentes. La mayoría de las mezclas muestran amplias divergencias con respecto a la idealidad, generalmente la tendencia sigue con las leyes en concentraciones muy altas y muy bajas. Si la mezcla sigue la ley de Raoult, las fracciones molares  $y_A$  para varias fracciones molares  $x_A$ , se obtienen a través de las presiones de vapor de ambos componentes en equilibrio (Richardson, Harker, & Backhurst, 2002).

Para soluciones ideales la ley de Raoult

#### Ecuación 2. Ley de Raoult

$$\bar{p}_A^* = p_A x$$

$$\bar{p}_B^* = p_B (1 - x)$$

Donde:

$\bar{p}_A^*, \bar{p}_B^*$  = Presión Parcial de equilibrio

$p_A, p_B$  = Presión de vapor

$p_A, p_B$  = Presión de vapor

### En fase ideal vapor

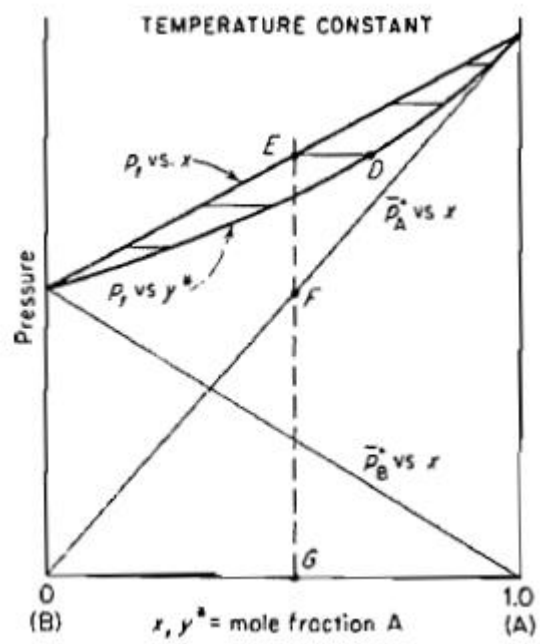
$$p_t = \bar{p}_A^* + \bar{p}_B^* = p_A x + p_B(1 - x)$$

Donde:

$p_t$  = Presión Total

### Figura 6.

Diagrama Presión vs Temperatura



Nota: Gráfica Presión vs Fracción molar para soluciones ideales. Tomado de(Treybal, 1981).

La composición de equilibrio puede ser calculada con la relación

$$y^* = \frac{\overline{p}_A^*}{p_t} = \frac{p_A x}{p_t}$$

$$1 - y^* = \frac{\overline{p}_B^*}{p_t} = \frac{p_B(1 - x)}{p_t}$$

**La volatilidad relativa es:**

**Ecuación 3. Volatilidad Relativa**

$$\alpha = \frac{p_A}{p_B} = \frac{K_1}{K_2}$$

## 2.5. Ecuaciones de estado

Las ecuaciones de estado son relaciones matemáticas, permiten determinar las propiedades desconocidas del sistema, o un componente en un estado especificado, a partir de valores definidos de otras propiedades. Para determinar las ecuaciones de estado, se establece sustancias puras, ya que su composición y química permanece estable; según Rolle (2006), al estudiar el “*Principio de estado: La cantidad de variables independientes, o propiedades del sistema requeridas para conocer por completo el estado de un sistema formado por una sustancia pura, es una más de las cantidades de modos distintos de trabajo reversible*”, las variables independientes son las propiedades conocidas del componente, y las variables dependientes de los componentes, son las variables desconocidas (Rolle, 2006).

## 2.6. Ecuaciones de estado cúbicas

### 2.6.1 Ecuación de Van der Waals

Las ecuaciones polinomiales que son cúbicas en el volumen molar ofrecen un acuerdo entre generalidad y simplicidad apropiado para muchos fines. Las

ecuaciones cúbicas son, de hecho, las ecuaciones más sencillas capaces de representar el comportamiento de líquidos y vapores. La primera ecuación cúbica de estado práctica fue propuesta por J.D. Van der Waals' en 1873. (Smith, Van Ness, & Abbott, 1997). Las constantes de fluido particular de Van Der Walls son calculadas mediante las ecuaciones  $a, b, \bar{v}_c$ , que están en función de la temperatura y la presión crítica de una especie (Moran & Shapiro, 2004).

**Ecuación 4. Ecuación de Van der Walls**

$$P = \frac{\bar{R}T}{\bar{v}_c - b} - \frac{a}{\bar{v}_c^2}$$

$$a = \frac{27 \bar{R}T_c}{64 p_c}$$

$$b = \frac{\bar{R}T_c}{8 p_c}$$

$$\bar{v}_c = \frac{3 \bar{R}T_c}{8 p_c}$$

Donde

$a, b$ = Constantes para un fluido en particular

$P$ = Presión

$T$  = Temperatura

$\bar{v}_c$  = Volumen.

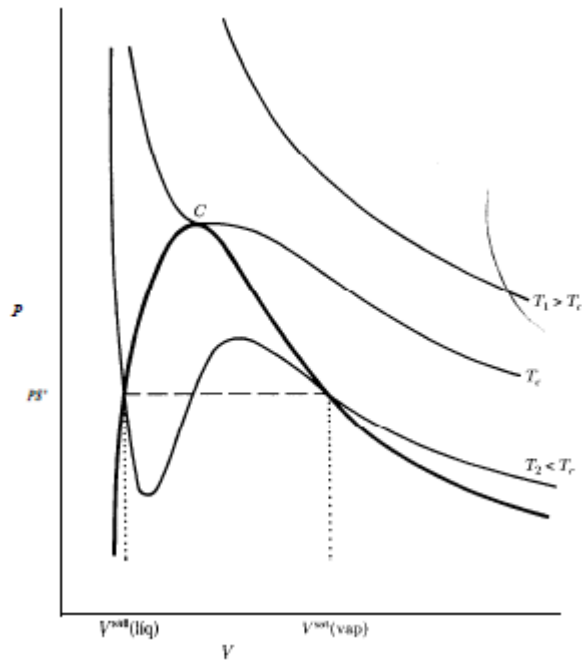
$T_c$  =Temperatura crítica

$P_c$  =Presión crítica

$\bar{R}$  = Constante universal de los gases

### Figura 7.

Isotermas



Nota: Isotermas. Tomado de (Smith, Van Ness, & Abbott, 1997).

#### 2.6.2 Ecuación de Redlich-Kwong

La ecuación de Redlich-Kwong fue una ecuación propuesta en 1949, es explícita para términos como la presión, pero no para volúmenes específicos o la temperatura, es utilizada para sistemas con presiones elevadas. La ecuación Redlich-Kwong con dos constantes tiene un mejor comportamiento que otras ecuaciones de estado que tienen varias constantes de ajuste, pero tienden a disminuir su precisión si existe un incremento en la presión o la densidad. Al igual que la ecuación Van de Waals las constantes  $a$ ,  $b$  de la ecuación pueden ser calculadas mediante las ecuaciones que representan las constantes de fluido particular con datos de  $p, v, T$ ; que requiere constantes para representar todos los datos de interés (Moran & Shapiro, 2004).

**Ecuación 5. Ecuación de Redlich-Kwong**

$$p = \frac{\bar{R}T}{\bar{v} - b} - \frac{a}{\bar{v}(\bar{v} + b)T^{1/2}}$$

$$a = a' \frac{\bar{R}^2 T_C^{5/2}}{p_C}$$

$$b = b' \frac{\bar{R}T_C}{p_C}$$

**2.6.3 Ecuación de Soave- Redlich-Kwong**

La ecuación de estado Soave Redlich-Kwong es una relación matemática basada en la ecuación de Redlich-Kwong que permite conocer en función de parámetros como la presión, temperatura y el volumen, parámetros desconocidos. La ecuación SRK Ecuación 6, permite la realización de cálculos de equilibrios, propiedades físicas (densidad, entalpía, entropía, capacidad calorífica) de las fases líquida y gaseosa; la simulación de equilibrios ELV favorece el cálculo de las propiedades a altas presiones, debido a la baja precisión de los métodos de cálculo basados en los coeficientes de actividad. Su campo de aplicación se enfoca en la estimación de propiedades de compuestos ligeros no polares, componentes pesados (polímeros) y compuestos muy polares (Soave & Coto, 2007).

**Ecuación 6. Ecuación de Soave- Redlich-Kwong**

$$p = \frac{\bar{R}T}{\bar{v} - b} - \frac{\alpha' \lambda}{\bar{v}(\bar{v} + b)}$$

$\omega = \text{factor excentrico}$



#### 2.6.4 Ecuación de Peng Robinson

En 1976 Peng y Robinson desarrollaron una ecuación de estado Ecuación 7, con dos parámetros y el tercer grado respecto al volumen, los parámetros son expresados en función de la presión crítica, temperatura crítica y el factor acéntrico de Pitzer; al obtener una aproximación, la mezcla no debe presentar interacción binaria y ser independiente de :temperatura, composición y presión (Zabaleta Mercado, 2010). La efectividad de una ecuación de estado depende de la correcta representación de las propiedades de  $p, V, T$  de un gas con gran precisión, las ecuaciones cubicas como Redlich-Kwong, Soave-Redlich-Kwong y Peng-Robinson pueden tener un grado de exactitud que oscila entre el 1 a 2% (Himmelblau, 1997).

#### Ecuación 7. Ecuación de Peng Robinson

$$p = \frac{\bar{R}T}{\bar{v} - b} - \frac{a\alpha}{\bar{v}(\bar{v} + b) + b(\bar{v} + b)}$$

$$\kappa = 0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992$$

Donde

$a, b$ = Constantes para un fluido en particular

$P$ = Presión

$T$  = Temperatura

$\bar{v}_c$  = Volumen.

$T_c$  =Temperatura crítica

$P_c$  =Presión crítica

$\bar{R}$  =Constante universal de los gases

$\omega$  =Factor excentrico

## 2.7. Métodos Rigurosos

Los métodos rigurosos permiten establecer modelos matemáticos de una columna de destilación con un grupo de ecuaciones denominadas MESH (Material, Equilibrium, Summation and Heat equations), a través de la representación matemática de los balances de materia global, por componente, balances de energía y las relaciones de equilibrio de fases, que describe el comportamiento de la columna de destilación en estado estacionario. La resolución de estas ecuaciones determina las condiciones de operación, con la especificación de parámetros como: Flujo, composiciones, y las condiciones termodinámicas de la alimentación, número de etapas de la columna, requerimientos de separación, etapas de alimentación, intercambio de calor, productos laterales y perfiles de presión de la columna (Gil C., Guevara L., García Z., & Leguizamón R., 2011).

## 2.8. Métodos Aproximados

### 2.8.1 Método McCabe-Thiele

El método McCabe-Thiele es un método utilizado para la separación de mezclas binarias, y obtiene una diferencia de composición definida, al representar la zona de agotamiento y enriquecimiento a fin de determinar el número de platos teóricos (McCabe, Smith, & Harriot, 2001).

Incluye un supuesto básico, que involucra los siguientes parámetros como: sin cambios en el flujo molar de líquido y vapor en cada sección (la sección de rectificación por encima de la alimentación y la sección de extracción por debajo de la alimentación). Esta suposición implica un mismo calor latente molar de vaporización de cada componente, y para muchos casos prácticos esto es esencialmente cierto. Es posible eliminar esta restricción usando balances de calor y al cambiar las pendientes de las líneas de operación (en efecto, líneas de operación

curvas), pero esta consideración adicional rara vez se justifica. El método McCabe-Thiele también se puede utilizar para casos de alimentación múltiple y de retirada de productos de etapas intermedias (Rousseau, 1987).

### **2.8.2 Ecuación de Smoker**

La ecuación analítica de Smoker presentada en 1938 se usa para la separación de componentes binarios, facilita el cálculo del número de etapas de una columna de destilación, y además de condiciones como volatilidad relativa constante y un desbordamiento molar constante (Bandyopadhyay, 2006).

### **2.8.3 Método Fenske-Underwood-Gilliland(FUG) o Shortcut**

El método Fenske Underwood y Gilliland es un método corto que proporciona características físicas de las columnas de destilación como: el número de platos y el diámetro de la columna, consiste en determinar el número de etapas ideales que se requieren para una separación especificada en base a las ecuaciones de Fenske, Underwood y Gilliland (Jiménez Gutierrez, 2003).

#### **2.8.3.1 Ecuación de Fenske**

Esta ecuación se utiliza para determinar el número ideal de etapas mínimas con los parámetros que provienen de balances de materia y la volatilidad relativa promedio entre los componentes clave seleccionados.

#### **Ecuación 8. Ecuación de Fenske**

$$N_{min} = \frac{\log \left\{ \left[ \frac{x_D^{(i)}}{x_B^{(i)}} \right] \left[ \frac{x_B^{(k)}}{x_D^{(k)}} \right] \right\}}{\log a_{i,k}}$$

*Nota:* (Narvaéz García, Zabala Loría, Rocha Uribe, & Rubio Atoche, 2013).

Despejo la composición del destilado  $x_D^{(i)}$  de la Ecuación 8 y determino la composición de cada componente en el destilado.

**Ecuación 9. Composición del Destilado**

$$x_D^{(i)} = x_B^{(i)} \left[ \frac{x_D^{(k)}}{x_B^{(k)}} \right] a_{i,k}^{N_{min}} \quad i = 1, 2, 3 \dots n, i \neq k$$

*Nota:* (Narvaéz García, Zabala Loría, Rocha Uribe, & Rubio Atoche, 2013).

La sumatoria de todas las composiciones de una corriente de mezcla analizada es 1, la composición del destilado quedará expresada de la siguiente forma

$$\sum_{i=1}^N x_D^{(i)} = \sum_{i=1}^N x_B^{(i)} \left[ \frac{x_D^{(k)}}{x_B^{(k)}} \right] a_{i,k}^{N_{min}} = 1$$

*Nota:* (Narvaéz García, Zabala Loría, Rocha Uribe, & Rubio Atoche, 2013)

Despejo la composición del componente de referencia en el destilado  $x_D^{(k)}$  en función de la composición de los fondos, el número mínimo de etapas y la volatilidad relativa.

**Ecuación 10. Composición del componente de referencia en el destilado**

$$x_D^{(k)} = \frac{x_B^{(k)}}{\sum_{i=1}^N x_B^{(i)} a_{i,k}^{N_{min}}} \quad i = 1, 2, 3 \dots n, i \neq k$$

*Nota:* (Narvaéz García, Zavala Loría, Ruíz Marín, & Canedo López, 2017).

### 2.8.3.2 Ecuación de Underwood

En el libro diseño de procesos en ingeniería química reporta la ecuación de Underwood compuesta en dos etapas. La etapa 1 señala las condiciones de alimentación para determinar el término  $\phi$  con el cálculo de las raíces en función de las volatilidades relativas de los componentes clave mediante métodos numéricos. El valor de  $\phi$  es reemplazado en la segunda ecuación, al determinar la razón de reflujo mínimo mediante la evaluación de las condiciones del destilado (Jiménez Gutierrez, 2003).

#### Ecuación 11. Ecuación de Underwood clase I

$$R_{min} = \frac{\alpha_{i,k}^{N_{min}} - \alpha_{l,k}}{(\alpha_{l,k} - 1) \sum_{i=1}^N x_B^{(i)} \alpha_{i,k}^{N_{min}}}$$

Nota: (Sundaram & Evans, 1993).

#### Ecuación 12. Ecuaciones de Underwood clase II

$$\sum_{i=1}^N \frac{\alpha_{i,k} x_B^{(i)}}{\alpha_{i,k} - \phi} = 1 - q$$

$$R_{min} + 1 = \sum_{i=1}^N \frac{\alpha_{i,j} x_{i,F}}{\alpha_{i,j} - \phi}$$

Nota: Tomado de (Banka & Dutta, 2016).

Donde:

$x_B^{(i)}$  = Composición de i la alimentación.

$\alpha_{i,k}$  = Volatilidad relativa a las condiciones de alimentación.

$\phi$  = Fracción del líquido en la alimentación.

$R_{min}$  = Reflujo mínimo.

$x_D^{(i)}$  = Composición del destilado.

$q$  = tipo de alimentación

### 2.8.3.3 Ecuación de Gilliland

Según (Sundaram & Evans, 1993), la ecuación de Gilliland, calcula el número mínimo de etapas ideales en función del reflujo, reflujo mínimo y el número de platos.

#### Ecuación 13. Ecuación de Gilliland

$$Y = 1 - \exp \left[ \left( \frac{1 + 54.4X}{11 + 117.2X} \right) \left( \frac{X - 1}{X^{0.5}} \right) \right]$$

$$Y = \frac{N - N_{min}}{N + 1}$$

$$X = \frac{R - R_{min}}{R + 1}$$

Nota: Tomado de (Sundaram & Evans, 1993).

### 2.8.3.4 Ecuación de balance Global para una columna de destilación

#### *discontinua*

Según (Narváez García, Zavala Loría, Ruíz Marín, & Canedo López, 2017), El método corto (shortcut) para una columna de destilación Batch desarrollada por el Dr. Umilla Diwekar, determina un conjunto de ecuaciones que representan el balance de masa global y balance de masa por componente para una columna de destilación Batch; que son detallados a continuación:

**Ecuación 14.** *Ecuación de balance global para destilación discontinua*

$$\frac{dB}{dt} = -D; \quad B_o = F$$

**Donde:**

$B_o$  = Flujo de alimentación

$D$  = Flujo de destilado

El flujo de destilado se obtiene a partir de un balance de masa en el top de la columna de destilación, el flujo del destilado se encuentra en función del flujo de vapor  $V$  y el reflujo  $R$ .

**Ecuación 15.** *Balance de masa en el Top de la columna*

$$D = \frac{V}{R + 1}$$

**Relación de reflujo (R):**

La relación de reflujo es el cociente entre el flujo de líquido que recircula y el flujo del destilado que se extrae por la columna de destilación

$$R = \frac{L}{D}$$

Donde

$L$  = Flujo de líquido que recircula

$D$  = Flujo de destilado

### **2.8.3.5 Ecuación de balance por componentes.**

Se establece una ecuación de balance de masa por componentes:

**Ecuación 16.** Ecuación de balance por componentes.

$$\frac{d[B \cdot x_f]}{dt} = -D \cdot x_D$$

Donde:

$B$  = Flujo

$x_f$  = Composición del componente  $i$  en la alimentación

$D$  = Flujo de destilado

$x_D$  = Composición del componente  $i$  en el destilado

Como la composición de los fondos y el flujo de destilados son variables en el tiempo aplicó derivada parcial:

$$B \frac{d[x_B]}{dt} + x_B \frac{d[B]}{dt} = -D \cdot x_D$$

**Ecuación 17.** Derivada parcial ecuación de balance por especies

$$B \frac{d[x_B]}{dt} + x_B \frac{d[B]}{dt} = -D \cdot x_D = \left(\frac{dB}{dt}\right) x_D$$

El balance global en una columna de destilación representa los cambios de flujo molar de los fondos con respecto al tiempo y es igual al flujo de destilado extraído. En consecuencia, reemplazo la Ecuación 14 en la Ecuación 17.

$$B \frac{d[x_B]}{dt} - D x_B = -D \cdot x_B$$

Despejo  $\frac{d[x_B]}{dt}$

$$\frac{d[x_B]}{dt} = \frac{D}{B} [x_B - x_D] \quad x_{Bo}^{(i)} = x_{Fo}^{(i)}$$



El balance de masa constituido en el top de la columna de destilación permite relacionar el destilado con el reflujo y el flujo de vapor, por lo tanto, reemplazo la Ecuación 15 en el despeje  $\frac{d[x_B]}{dt}$  para calcular los cambios de la composición de los fondos con respecto al tiempo.

**Ecuación 18.** *Variación de composición(fondos) con respecto al tiempo.*

$$\frac{d[x_B]}{dt} = \frac{V}{B(R + 1)} [[x_B - x_D]]$$

## 2.9. Régimen de reflujo

Las columnas de destilación operan bajo distintos regímenes de reflujo como: reflujo constante, reflujo variable y reflujo óptimo. Además, existen dos variantes a las condiciones de reflujo: total y cero. Una columna de destilación opera bajo un régimen de reflujo constante, con concentraciones de los componentes que varían de forma constante en el domo de la columna en cada instante de tiempo, por lo tanto, la composición del producto es una concentración promedio. El régimen de reflujo variable proporciona composiciones constantes del componente de interés sin variación de tiempo durante todo el funcionamiento de la columna y la composición de los componentes restantes son constantes o varían en función del modelo matemático del proceso. El reflujo óptimo resuelve problemas de control óptimo, al establecer objetivos como: menor tiempo de separación, mínimo consumo de energía, máxima fracción de destilado; al conocer el índice de reflujo. Una política de reflujo variable estabiliza el proceso de separación sin la presencia de productos en el domo de la columna; y a reflujo cero facilita la reducción de componentes con altas concentraciones a concentraciones deseadas en un menor tiempo de operación (N.García, Z. Loría, R.Marín, & C.Quiroz, 2014).

## Capítulo III

### 3. Metodología de desarrollo de proyecto

Con el propósito de cumplir con los objetivos se plantea la siguiente metodología que permite el desarrollo de la investigación al considerar los siguientes parámetros que se detallan a continuación:

#### 3.1. Datos teóricos

##### 3.1.1 Selección de mezcla

Para el desarrollo de esta investigación se selecciona una mezcla multicomponente de nafta liviana proveniente del proceso de destilación atmosférica del crudo de la Refinería Estatal de Esmeraldas, esta mezcla se caracteriza por presentar un conjunto de componentes orgánicos en su mayoría alcanos de cadena lineal, componentes ramificados y cíclicos (Sinche A., 2012).

Los componentes seleccionados de la Tabla 1, se seleccionan a partir de parámetros de establecidos: componentes predominantes en la mezcla de nafta liviana seleccionada, temperaturas de ebullición no adyacentes. Las composiciones molares de cada componente se calculan a partir de:

- La conversión de porcentaje molar a fracción molar.
- Multiplicación de la fracción molar  $i$  por la base de cálculo(100 Kmol).
- Sumatoria de los 12 compuestos seleccionados.
- Cálculo de la nueva fracción molar ( $Flujo\ i / Flujo\ Total$ ).

Donde  $i$  es el componente de mezcla.

**Tabla 1.**

*Componentes de mezcla de Nafta de Refinería de Esmeraldas.*

<b>N</b>	<b>Componente</b>	<b>%Molar</b>
1	n-Butano	12,4418
2	i-Pentano	20,8231
3	n-Pentano	22,7664
4	Ciclopentano	2,4568
5	2-Metilpentano	7,9138
6	3-Metilpentano	4,9981
7	n-Hexano	7,648
8	Metilciclopentano	5,5294
9	ciclohexano	1,8817
10	2-Metilhexano	1,1804
11	1t,2-Dimetilciclopentano	1,7754
12	n-Heptano	1,8233

*Nota:* Componentes de mezcla seleccionados. Recuperado de (Sinche A., 2012).

La volatilidad relativa se encuentra relacionada con la presión de vapor de cada componente puro por la ley de Raoult. Además, la presión de vapor se relaciona con la temperatura por la ecuación de Antoine. Para el cálculo de la volatilidad relativa se aplica la ecuación y los coeficientes de Antoine que se detallan a continuación:

**Ecuación 19. Ecuación de Antoine**

$$\log_{10} Pv = A + \frac{B}{C + T(^{\circ}\text{C})} \quad Pv = [\text{mmHg}]$$

*Nota:* Ecuación de Antoine y sus coeficientes. Tomado de (Forziati, Norris, & Rossini, 1949).

**Tabla 2.***Coeficientes de Antoine para cada componente parte I*

<b>N°</b>	<b>componente</b>	<b>A</b>	<b>B</b>	<b>C</b>
1	n-butano	7,00908	1022,3862	248,145
2	i-pentano	7,0303	1140,4542	247,012
3	n-pentano	7,00892	1134,1488	238,678
4	ciclopentano	7,04267	1202,5299	239,69
5	2-metilpentano	7,07962	1274,6369	243,362
6	3-metil-pentano	7,07774	1282,3647	242,278
7	n-hexano	6,98978	1216,9154	227,451
8	Metilciclopentano	7,06199	1304,0792	240,043
9	ciclohexano	6,88938	1200,8256	218,815

*Nota:* Coeficientes de Antoine para 9 componentes de mezcla. Tomado de (Yaws, 2015).

**Tabla 3.***Coeficientes de Antoine para cada componente parte II*

<b>N°</b>	<b>componente</b>	<b>A</b>	<b>B</b>	<b>C</b>
10	2-metilhexano	6,87319	1236,026	219,545
11	1t,2-dimetilciclopentano	6,84422	1242,748	221,686
12	n-heptano	6,90027	1266,871	216,757

*Nota:* Coeficientes de Antoine para componentes de mezcla. Tomado de (Forziati, Norris, & Rossini, 1949).

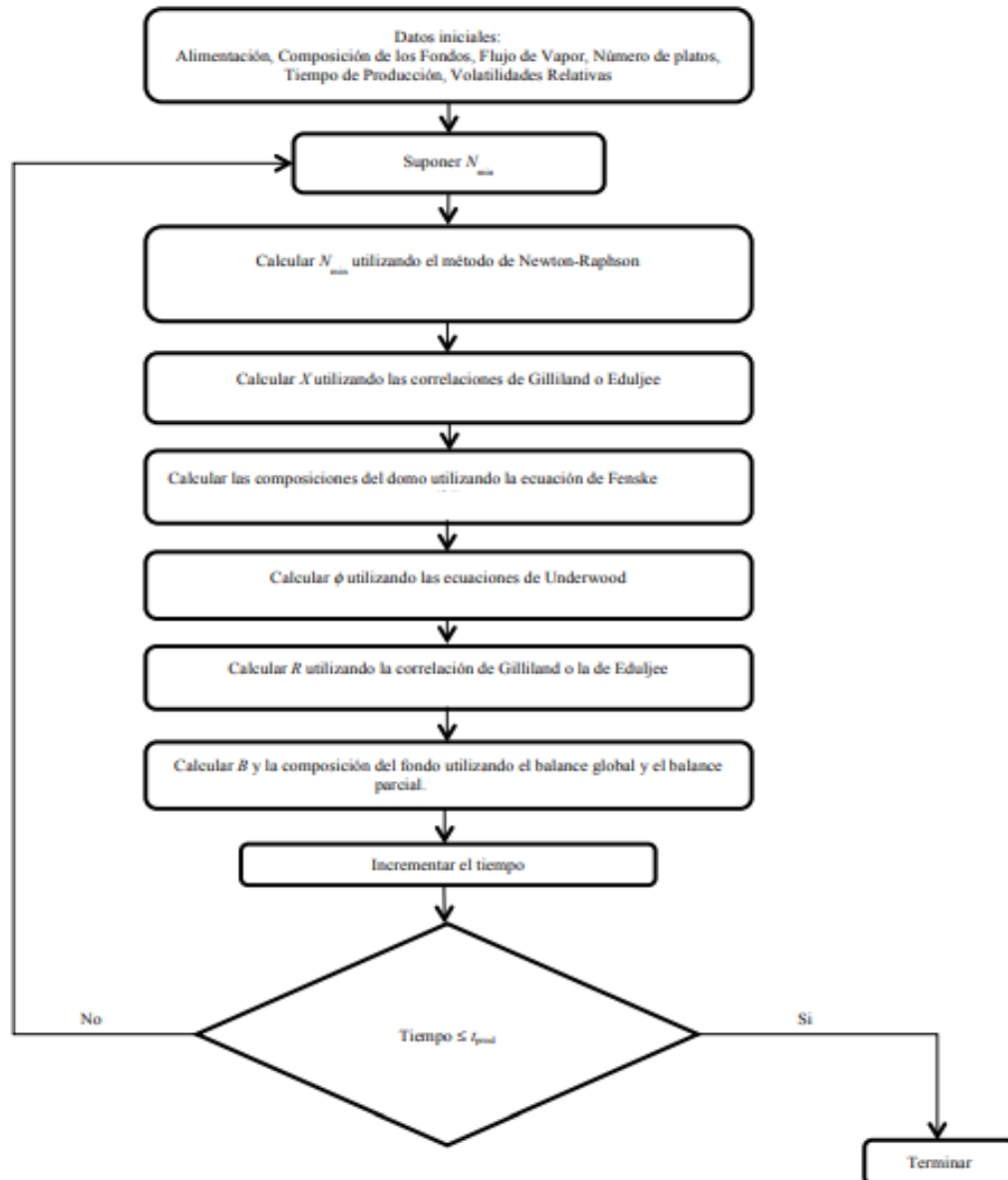
La presión de operación calculada por la ecuación de Antoine se encuentra en unidades de *mmHg*.

### 3.2. Algoritmo para el método corto para destilación discontinua

El algoritmo del método de corto o shortcut establecido por (Narvaéz García, Zabala Loría, Rocha Uribe, & Rubio Atoche, 2013)

**Figura 8.**

*Algoritmo Shortcut para Destilación Batch*



*Nota:* Algoritmo método corto (Shortcut) para una columna de destilación discontinua. Tomado de (Narvaéz García, Zabala Loría, Rocha Uribe, & Rubio Atoche, 2013)

### 3.2.1 Suposiciones a considerar para el método shortcut

El método shortcut establecido por Sundaran y Evans en 1993, para un proceso de destilación multicomponente discontinua, según Narvaéz García y sus colaboradores (2013), establece las siguientes condiciones fundamentales: “*flujo molar de vapor constante, volatilidad relativa constante en toda la columna de destilación y acumulación despreciable*”, la mezcla de estudio considerada como mezcla ideal, que permiten determinar las variables dependientes planteadas (Narvaéz García, Zabala Loría, Rocha Uribe, & Rubio Atoche, 2013).

Otros parámetros a considerar para el desarrollo del algoritmo shortcut es: la composición del componente deseado o también denominado componente clave ligero ( $lk$ ), debe mantenerse constante durante toda la operación; que incide en el cálculo del reflujo en cada intervalo de tiempo. El reflujo se obtiene por medio del despeje de la ecuación de Gilliland en términos de la correlación de Eduljee y el reflujo mínimo (Narvaéz García, Zabala Loría, Rocha Uribe, & Rubio Atoche, 2013).

#### Ecuación 20. Determinación del reflujo

$$R = \frac{X - R_{min}}{1 - X}$$

*Nota:* Tomado de (Narvaéz García, Zabala Loría, Rocha Uribe, & Rubio Atoche, 2013).

### 3.2.2 Cálculo del número mínimo de etapas

El número mínimo de etapas se calcula en un proceso interactivo utilizando el “*método de Newton-Raphson*”, esta función se encuentra construida con respecto a la composición del destilado, la composición de los fondos del primer componente o también denominado componente clave ligero  $lk$ , la composición en los fondos de los demás componentes y la relación entre las volatilidades relativas de los componentes restantes, con respecto a la volatilidad del componente clave ligero

mostrada, en la Ecuación 21 (Narvaéz García, Zabala Loría, Rocha Uribe, & Rubio Atoche, 2013).

$$\left(\frac{x_B^{(1)}}{x_B^{(1)}}\right) \left[ \sum_{j=2}^N \left(\frac{\alpha_{j,k}}{\alpha_{1,k}}\right)^{N_{min}} x_B^{(j)} \right] = 1 - x_D^{(1)}$$

**Ecuación 21.** *Función para determinación del número mínimo de etapas.*

$$f(N_{min}) = x_D^{(1)} \left[ \sum_{j=2}^N \left(\frac{x_B^{(j)}}{x_B^{(1)}}\right) \left(\frac{\alpha_{j,k}}{\alpha_{1,k}}\right)^{N_{min}} + 1 \right] - 1 = 0$$

*Nota* Tomado de (Narvaéz García, Zabala Loría, Rocha Uribe, & Rubio Atoche, 2013).

El método Newton-Raphson es una relación entre la función denominada número mínimo de etapas y su respectiva derivada; por lo tanto, es necesario calcular la derivada de la Ecuación 21 y se obtiene la siguiente expresión:

**Ecuación 22.** *Derivada de la función, cálculo de número mínimo de etapas.*

$$f'(N_{min}) = x_D^{(1)} \left[ \sum_{j=2}^N \left(\frac{x_B^{(j)}}{x_B^{(1)}}\right) \left(\frac{\alpha_{j,k}}{\alpha_{1,k}}\right)^{N_{min}} + \ln\left(\frac{\alpha_{j,k}}{\alpha_{1,k}}\right) \right]$$

*Nota:* Tomado de (Narvaéz García, Zabala Loría, Rocha Uribe, & Rubio Atoche, 2013).

Con la obtención de la función para el cálculo del número mínimo de etapas y su respectiva derivada se reemplazar en la estructura del algoritmo Newton-Raphson y determinar el número mínimo de etapas teóricas mediante un proceso interactivo mostrado en la Ecuación 23.

**Ecuación 23. Número mínimo de etapas**

$$N_{minnueva} = N_{min,anterior} - \frac{f(N_{min})}{f'(N_{min})}$$

*Nota:* Tomado de (Narvaéz García, Zabala Loría, Rocha Uribe, & Rubio Atoche, 2013).

**3.2.3 Correlaciones de Gilliland y Eduljee**

Una vez calculado el número mínimo de etapas teóricas mediante el método Newton-Raphson: es necesario calcular el término X de las ecuaciones de Gilliland. Una ecuación que relaciona las ecuaciones de Gilliland es la correlación desarrollada por Eduljee.

**Ecuación 24. Ecuación de Eduljee**

$$Y = (0,75 - X)^{0,5668}$$

*Nota:* Tomado de (Narvaéz García, Zabala Loría, Rocha Uribe, & Rubio Atoche, 2013).

Al despejar el término X de la Ecuación 24 y reemplazar el término Y de la ecuación de Gilliland se obtiene la siguiente expresión:

**Ecuación 25. Correlación de Eduljee**

$$X = \left[ 1 - \frac{4}{3} \left( \frac{N - N_{min}}{N + 1} \right) \right]^{1,7643}$$

*Nota:* Tomado de (Narvaéz García, Zabala Loría, Rocha Uribe, & Rubio Atoche, 2013)



### 3.2.4 Composición del destilado del domo

Las composiciones del destilado se obtienen a partir de las modificaciones de la ecuación de Fenske (Ecuación 9), para los cálculos del componente de referencia en el destilado se utiliza la (Ecuación 10); con la obtención de las composiciones del destilado y del destilado de referencia se procede a la determinación del reflujo mínimo (Narváez García, Zavala Loría, Ruíz Marín, & Canedo López, 2017).

### 3.2.5 Determinación del reflujo mínimo $R_{min}$

Según (Banka & Dutta, 2016), para determinar el Reflujo mínimo se utiliza las ecuaciones de Underwood. Existe dos tipos de separaciones que se conceptualizan de la siguiente manera: separaciones Clase I son aquellas cuyos componentes se producen en una columna de destilación de platos infinitos, los componentes de la alimentación se encuentran presentes en el domo y en el fondo, en tanto, las separaciones Clase II son aquellas que se efectúan en una columna de destilación de platos infinitos, donde uno o varios componentes de la alimentación, no se distribuyen a lo largo de la columna de destilación (Narvaéz García, Zabala Loría, Rocha Uribe, & Rubio Atoche, 2013).

Al despejar término  $R_{min}$  de la Ecuación 12 se obtiene la siguiente expresión:

#### **Ecuación 26. Cálculo de Reflujo mínimo**

$$R_{min} = -1 + \sum_{i=1}^N \frac{\alpha_{i,k} x_D^{(i)}}{\alpha_{i,k} - \emptyset}$$

*Nota:* Tomado de (Banka & Dutta, 2016).

Donde  $i$  es el componente de mezcla, el término  $\sum_{i=1}^N \frac{\alpha_{i,k} x_D^{(i)}}{\alpha_{i,k} - \emptyset}$  de la ecuación de Underwood( Ecuación 26 ), para la determinación del término  $\emptyset$  es necesaria la ecuación de Underwood clase II en función de la composición de los fondos, y

establecer la composición del destilado con la ecuación de Fenske y sus respectivas modificaciones; la sumatoria de todas las composiciones en el domo debe ser igual a 1 (Narváez García, Zavala Loría, Ruíz Marín, & Canedo López, 2017).

### **3.2.6 Determinación del reflujo R**

El reflujo es calculado a partir del reflujo mínimo previamente obtenido de las ecuaciones de Underwood( Ecuación 26), y la variable X se determina mediante las ecuaciones de Gilliland y las correlaciones de Eduljee( Ecuación 25) , para un posterior cálculo de la composición en el reboiler (Narváez García, Zavala Loría, Ruíz Marín, & Canedo López, 2017).

### **3.2.7 Concentración del reboiler B**

Según (Sundaram & Evans, 1993) y (Narváez García, Zabala Loría, Rocha Uribe, & Rubio Atoche, 2013), la composición del reboiler se calcula a partir del balance de materia global y balances de materia por componentes, al determinar flujo sobrante en los fondos y la composición de la mezcla en el reboiler.

## **3.3. Solución numérica del modelo matemático**

La solución numérica del Algoritmo involucra un proceso interactivo de cálculo del número mínimo de etapas mediante el método de Newton Raphson, el reflujo se obtiene en cada instante de tiempo durante toda la operación, al mantener constante la concentración del componente clave ligero en el destilado (Narváez García, Zabala Loría, Rocha Uribe, & Rubio Atoche, 2013).

### **3.3.1 Simulación computacional**

La simulación del algoritmo de método corto y las ecuaciones de modelamiento establecidas por (Narváez García, Zabala Loría, Rocha Uribe, & Rubio Atoche, 2013), se desarrollan en el entorno computacional de Matlab para el



### 3.3.2.2 Selección del paquete termodinámico

El paquete termodinámico utilizado para el desarrollo de este proceso de destilación es el paquete termodinámico Soave- Redlich-Kwong que ha presentado buenos resultados en el proceso de simulación.

**Figura 11.**

*Selección del Paquete Termodinámico*

The screenshot shows the 'K-value Models' tab selected. The 'Global K-value Model' is set to 'SRK'. Under 'Global Phase Option', 'Vapor/Liquid/Solid' is selected. Under 'Water/Hydrocarbon Solubility', 'Immiscible' is selected. The 'Wilson model salt' is set to '<None>'. The 'No. of BIP sets' and 'Default BIP set' are both set to '1'. There are also options for 'Ethane/Ethylene, Propane/Propylene' (Regular SRK/PR BIPs selected) and 'Vapor Phase Association' (No association selected).

*Nota:* Opción K- Models.

### 3.3.2.3 Selección del sistema de Unidades

El sistema de unidades seleccionada para el desarrollo de esta simulación es el Sistema Internacional de Medida (SI).

**Figura 12.**

*Selección de Unidades*

The 'Units selection' dialog box shows the following settings:

Property	Unit
Time	h
Mass/Mole	kmol
Temperature	C
Pressure	mmHg

*Nota* Opción Units Selections.

### 3.3.2.4 Corriente de alimentación

La corriente de alimentación y las composiciones son previamente calculadas mediante el procedimiento detallado en la sección 3.1.1, la sumatoria de todas las composiciones es igual a 1.

#### Figura 13.

*Composición de la corriente de Alimentación*

Comp unit	mole frac
N-Butane	0.1363661
I-Pentane	0.2282279
N-Pentane	0.2495271
Cyclopentane	0.02692732
2-Methylpentane	0.0867378
3-Methylpentane	0.05478078
N-Hexane	0.08382455
Methylcyclopenta	0.06060399
Cyclohexane	0.02062404
2-Methylhexane	0.01293756
Trans-1,2-Dimeth	0.01945895
N-Heptane	0.01998395

*Nota* Opción Component Unit.

### 3.3.2.5 Temperatura de ebullición

La temperatura de ebullición de la mezcla seleccionada de nafta liviana se determina a partir del simulador al ingresar los datos en la corriente de alimentación: las composiciones molares de la mezcla, la presión, y una fracción de vapor de 0. La temperatura obtenida esta especificada en unidades de grados Celsius.

### 3.3.2.6 Condiciones de entrada en la alimentación

Las condiciones de presión y temperatura para el proceso de destilación Batch por realizar son de 1 atm (760mmHg) y a la temperatura de ebullición calculada de la mezcla.

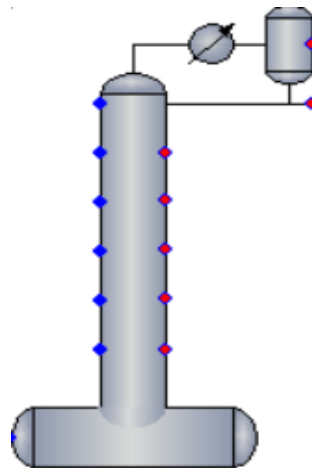
**Figura 14.***Condiciones de entrada*

Temp C	32.1129
Pres mmHg	760
Vapor Fraction	0

**3.3.2.7 Columna de destilación**

La Alimentación previamente cargada se calcula, con el ingreso de los siguientes parámetros: fracción molar calculada con el procedimiento en la sección 3.1.1, temperatura de ebullición, presión(760 *mmHg*). Además, las restricciones establecidas en el Algoritmo shortcut determinado por (Narvaéz García, Zabala Loría, Rocha Uribe, & Rubio Atoche, 2013):

- Acumulación despreciable
- Flujo de vapor constante
- Concentración del componente de interés constante en el destilado
- Volatilidad relativa constante en toda la columna.

**Figura 15.***Columna de destilación Batch*

*Nota:* Columna de destilación Discontinua provista por el simulador comercial.

### 3.3.3 Selección del número de plato y la presión del condensador

La presión del condensador será establecida en 1 atm (760 mmHg), y el Número de platos=40.

**Figura 16.**

*Presión del condensador*

Parameter	Value	Unit
Number of stages	40	
Number of operation steps	1	
Condenser type	0 Total	
Cond pressure	760	mmHg
Cond pres drop		mmHg
Colm pres drop		mmHg
Method	Simultaneous Correction	
Model	Regular VLE model	
Convergence parameters		
Use auto estimation	<input checked="" type="checkbox"/>	
Number of iterations		
Damping factor		

*Nota: Opción General*

### 3.3.4 Sección del reflujo, tiempo y flujo de vapor

El flujo de vapor condicionado es de 110 kmol/h, el radio reflujo es el valor calculado por el algoritmo planteado por (Narvaéz García, Zabala Loría, Rocha Uribe, & Rubio Atoche, 2013), este proceso se realiza en cada intervalo de tiempo hasta que se cumpla el tiempo de operación.

**Figura 17.**

*Selección del reflujo, tiempo, flujo de vapor.*

General	Additional Settings	Estimations
Startup option: 1. Start with total reflux		Step: 1
Product assignment:		Integration time step size in hours:
Distillate tank #	2	Step size (hr) 0.05 hr
Decanter tank #		Record frequency 3 iterations
First spec mode	0. Reflux ratio	Operation step stop options:
First spec value	9.28114	Stop when: Time
Second spec mode	4. Boil-up mole rate	Stop value 0.1 hr
Second spec value	110 kmol/h	



## Capítulo IV

### 4. Resultados y discusión

#### 4.1. Composición de la corriente de Alimentación

A partir del proceso de selección de componentes de mezcla de nafta liviana proveniente de la Refinería de Esmeraldas visto en la Tabla 1, se determina las composiciones molares con los siguientes resultados.

**Tabla 4.**

*Composición de Alimentación*

Número	Componente	Composición Molar
1	n-butano	0,13636612734578
2	i-pentano	0,22822786946696
3	n-pentano	0,24952706212968
4	ciclopentano	0,02692731772437
5	2-metilpentano	0,08673779184596
6	3-metil pentano	0,05478078261079
7	n-hexano	0,08382453840606
8	Metilciclopentano	0,06060400139415
9	ciclohexano	0,02062403686175
10	2-metilhexano	0,01293756343286
11	1t,2-dimetilciclopentano	0,01945895469222
12	n-heptano	0,01998395408941

*Nota:* Composiciones molares de la corriente de alimentación.

#### 4.2. Modelado matemático

Para la determinación del modelo matemático, el algoritmo planteado (Sundaram & Evans, 1993) y (Narvaéz García, Zabala Loría, Rocha Uribe, & Rubio Atoche, 2013), se enfoca en discretizar los balances de masa globales y masa por componentes; se logró obtener las siguientes ecuaciones:

Se discretiza la ecuación de balance de masa global; y determinar la variación de los flujos molares con respecto a la variación de tiempo

$$\frac{\Delta B}{\Delta t} = -D$$

Despejo  $\Delta B$

**Ecuación 27.** *Discretización de la ecuación de balance global*

$$\Delta B = -D \cdot \Delta t$$

$$\Delta B = B_n - B_A$$

La variación de los flujos molares en los fondos se determina mediante la diferencia de los flujos molares nuevos y los flujos molares anteriores que al ser reemplazados en la ecuación discretizada se obtiene la siguiente expresión:

$$B_N = B_A - D \cdot \Delta t$$

Donde:

$B_N$  = Flujo Molar Nuevo.

$B_A$  = Flujo Molar Anterior.

$D$  = Flujo de destilado

$\Delta t$  = Variación de Tiempo

Además, si se relaciona la expresión anterior con la Ecuación 15 correspondiente al balance de materia en el top de la columna de destilación se obtiene la siguiente expresión:

**Ecuación 28** Ecuación para determinación del flujo molar en el fondo

$$B_N = B_A - \frac{V}{R + 1} \cdot \Delta t$$

*Nota:* Tomado de (Sundaran & Evans, 1993) y (Narvaéz García, Zabala Loría, Rocha Uribe, & Rubio Atoche, 2013).

Continuando con el desarrollo del modelo matemático es necesario determinar el balance de materia parcial (Ecuación 18), para cada componente presente en la mezcla; siendo  $i$  un componente, visto en (Sundaram & Evans, 1993).

$$\frac{d [x_B^{(i)}]}{dt} = \frac{D}{B} [x_B^{(i)} - x_D^{(i)}] \quad x_{B_0}^{(i)} = x_{F_0}^{(i)}$$

Al establecer cambios mínimos en instantes determinados se procede aplicar la discretización de la ecuación para balance por componentes de mezcla

$$\frac{\Delta x_B^{(i)}}{\Delta t} = \frac{D}{B} [x_B^{(i)} - x_D^{(i)}]$$

Despejo  $\Delta t$  de la Ecuación 27

$$\Delta B = -D \cdot \Delta t$$

$$\Delta t = -\frac{\Delta B}{D}$$

Despejo  $\Delta x_B^{(i)}$  y reemplazo  $\Delta t$

$$\Delta x_B^{(i)} = \frac{D}{B} [x_B^{(i)} - x_D^{(i)}] \cdot \Delta t$$

$$\Delta x_B^{(i)} = \frac{D}{B} [x_B^{(i)} - x_D^{(i)}] \cdot -\frac{\Delta B}{D}$$

$$\Delta x_B^{(i)} = [x_D^{(i)} - x_B^{(i)}] \cdot \frac{\Delta B}{B}$$

$$\Delta x_B^{(i)} = x_{B_N}^{(i)} - x_{B_A}^{(i)}$$

La variación de las composiciones molares en los fondos se calculó a través de la diferencia de la composición molar nueva y la composición molar anterior que al ser reemplazada en la ecuación discretizada se obtiene la siguiente expresión:

**Ecuación 29. Balance parcial por componente  $i$**

$$x_{B_N}^{(i)} = x_{B_A}^{(i)} + [x_B^{(i)} - x_D^{(i)}]_A * \left| \frac{B_N - B_A}{B_A} \right|$$

*Nota:* Tomado de (Narváez García, Zavala Loría, Ruíz Marín, & Canedo López, 2017) y (Sundaram & Evans, 1993).

#### 4.3. Temperatura de ebullición

La temperatura de ebullición se logró determinar mediante la presión de operación y la fracción de vapor de la mezcla, y se obtuvo los siguientes resultados vistos en la Figura 18, se obtuvo un valor de **32.1129 °C**.

**Figura 18.**

*Temperatura de Ebullición*

<b>Temp C</b>	<b>32.1129</b>
<b>Pres mmHg</b>	<b>760</b>
<b>Vapor Fraction</b>	<b>0</b>

*Nota:* Temperatura de Ebullición de mezcla.

#### 4.4. Cálculos de presión de vapor.

La presión de vapor se calculó a partir de la ecuación de Antoine, expresada en términos de la presión de vapor de una sustancia pura y la temperatura de operación. La presión de vapor se calculó a una temperatura  $T=32.1129^{\circ}\text{C}$ . se obtuvo los siguientes resultados:

**Tabla 5.**

*Presiones de Vapor*

PROPIEDADES					
N°	Componente	P.VAPOR [mmHg]	T.Ebullicion [°C]		
1	n-Butano	28.819747	-0.489907		
2	i-Pentano	19.000773	27.830255		
3	n-Pentano	16.787549	36.060267		
4	Ciclopentano	13.713740	49.250747		
5	2-Metilpentano	11.618135	60.209248		
6	3-Metilpentano	11.070061	63.270531		
7	n-Hexano	9.988879	68.709951		
8	Metilciclopentano	9.682572	71.849892		
9	Ciclohexano	8.197585	80.749851		
10	2-Metilhexano	7.111103	90.051559		
11	1t,2-dimetilciclopentano	7.012081	91.869531		
12	n-Heptano	6.109072	98.427660		

*Nota:* Presión de vapor de todos los componentes puros de mezcla.

##### 4.4.1 Volatilidad Relativa

El Algoritmo shortcut o método corto planteado por (Sundaram & Evans, 1993) y (Narvaéz García, Zabala Loría, Rocha Uribe, & Rubio Atoche, 2013), trabaja con volatilidades relativas constantes durante todo el proceso de destilación, para este proceso se procedió encontrar la volatilidad relativa en función del componente de referencia o conocido como componente clave pesado.

**Tabla 6.***Volatilidades Relativas*

N°	Componente	V.Relativa
1	n-Butano	1.516767
2	i-Pentano	1.000000
3	n-Pentano	0.883519
4	Ciclopentano	0.721746
5	2-Metilpentano	0.611456
6	3-Metilpentano	0.582611
7	n-Hexano	0.525709
8	Metilciclopentano	0.509588
9	Ciclohexano	0.431434
10	2-Metilhexano	0.374253
11	1t,2-dimetilciclopentano	0.369042
12	n-Heptano	0.321517

*Nota:* Volatilidades relativas de los componentes de mezcla calculada a 1 atm de presión, calculado en la Plataforma Matlab

La simulación computacional del algoritmo de método corto se lo desarrolló en la plataforma Matlab con las siguientes condiciones iniciales

**Tabla 7.***Condiciones de entrada para el estudio del reflujo variable*

Parámetro	Valor
Presión (mmHg)	760
Flujo de vapor(Kmol/h)	110
Alimentación(kmol)	200
Composición Deseada(%)	99
$\Delta T(H)$	0.1

*Nota:* Tomado de (Narvaéz García, Zabala Loría, Rocha Uribe, & Rubio Atoche, 2013).

- Componente Clave Liger: N-Butano.
- Componente de referencia: Isopentano.

#### 4.5. Simulaciones en Matlab

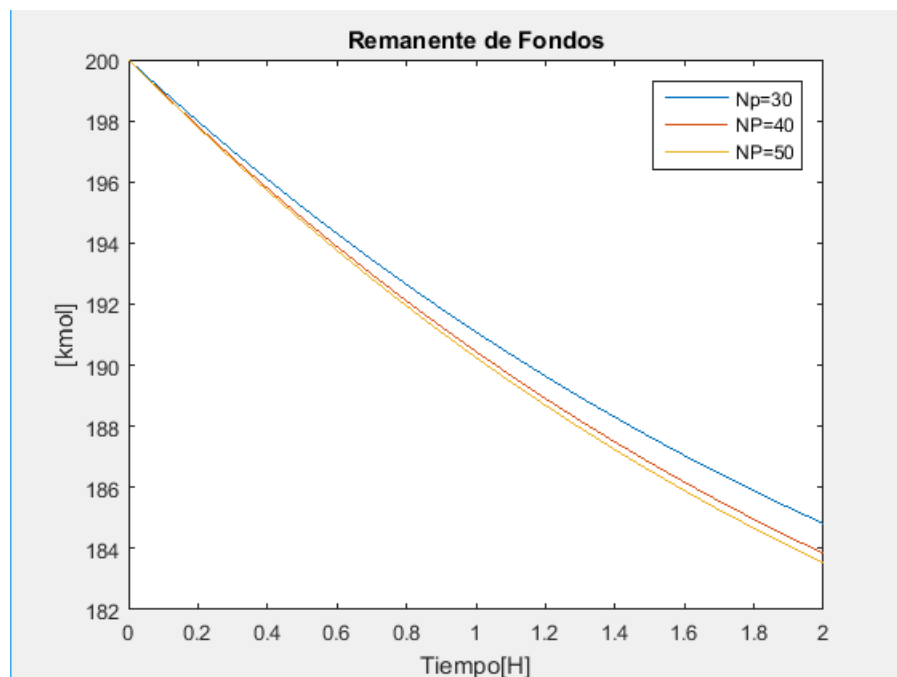
Se evaluó el algoritmo matemático propuesto, mediante lenguaje de programación (Programación vista en los anexos ), a partir de un parámetro cómo es el número de platos, y se obtuvo los siguientes resultados:

##### 4.5.1 Remanente de los fondos

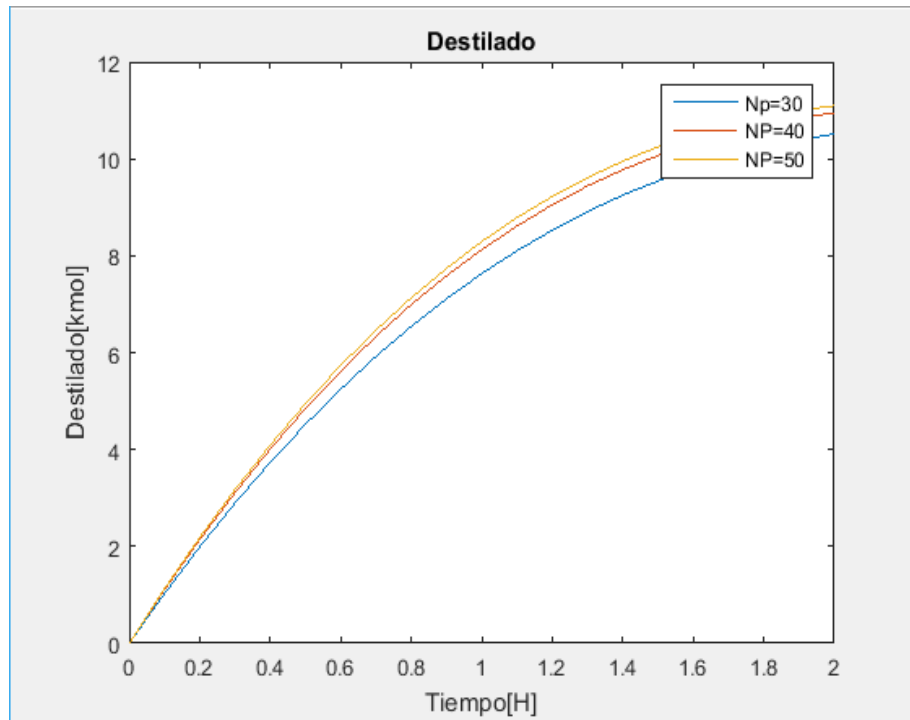
En la Figura 19 , se observa la variación del remanente de la mezcla de alimentación con respecto al tiempo de operación, a las mismas condiciones de alimentación: para una columna de destilación Batch de 30 y 40 platos, al transcurrir dos horas de proceso se obtuvo un remanente final de 184.815 Kmol y 183.833 Kmol respectivamente.

#### Figura 19.

*Remanente de Fondos*



*Nota:* Eje X (Tiempo de operación en Horas), Eje Remanente de los fondos en unidades de Kmol.

**Figura 20.***Variación del Destilado*

*Nota:* Flujo de destilado calculado en unidades de Kmol.

En la Figura 20, se observa, la variación de la corriente de destilado en función del tiempo. La evaluación 2 presenta la mayor cantidad de destilado igual a 10.947 Kmol con 40 platos; y cumple con el balance de masa global de la columna de destilación Batch visto en la Ecuación 14.

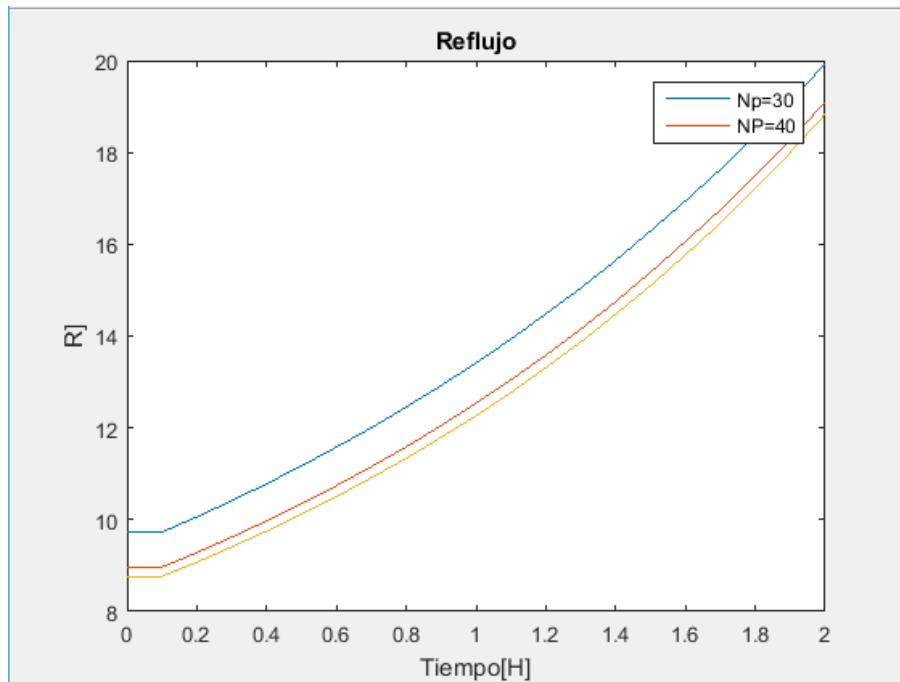
#### **4.5.2 Relación de reflujo.**

En la Figura 21, se observa la variación de la relación de reflujo en el proceso de destilación Batch, y su valor de reflujo inicial necesario para determinar la composición requerida de producto en el destilado a las evaluaciones de 30 y 40 platos fueron: 9.7302 y 8.9685 respectivamente.



**Figura 21.**

*Variación de relación de Reflujo*



*Nota:* Variación del Reflujo con respecto al tiempo.

Para llegar a la composición requerida el proceso con 40 platos, obtuvo una menor relación de reflujo final de 19.0692 a comparación de 19.923, valor obtenido por el proceso a 30 platos

#### **4.5.3 Composición de los fondos**

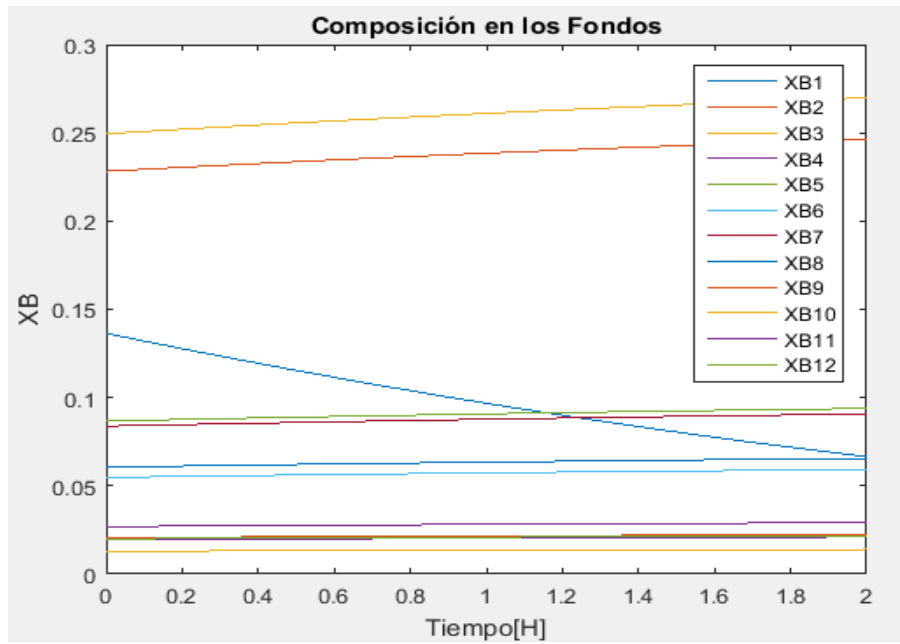
Para ambas evaluaciones los valores obtenidos de la composición de los fondos para el componente clave ligero (N-Butano) fueron:

Evaluación 1: 0.0665

Evaluación 2: 0.0617.

**Figura 22.**

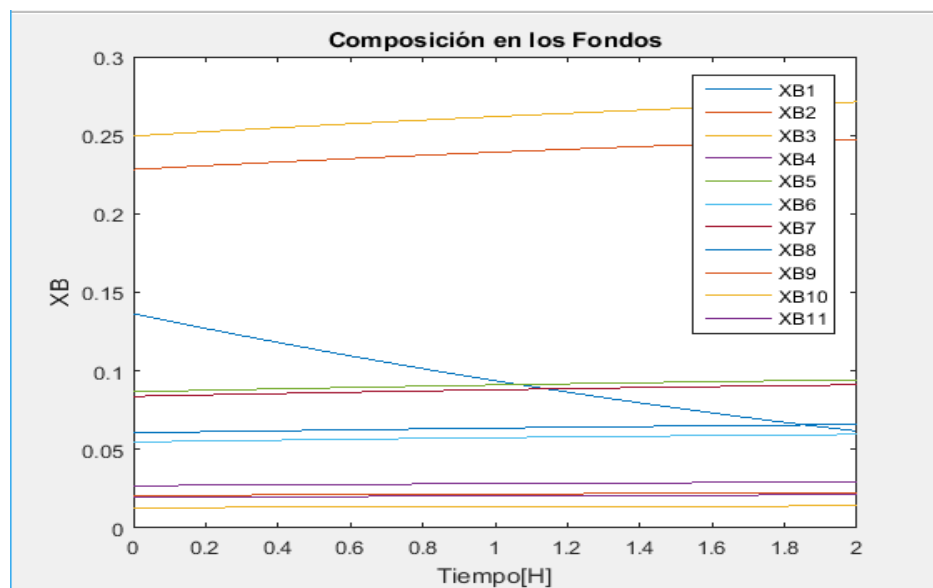
Variación de la composición molar de los Fondos NP=30.



Nota: Composición Molar a T=2h.

**Figura 23.**

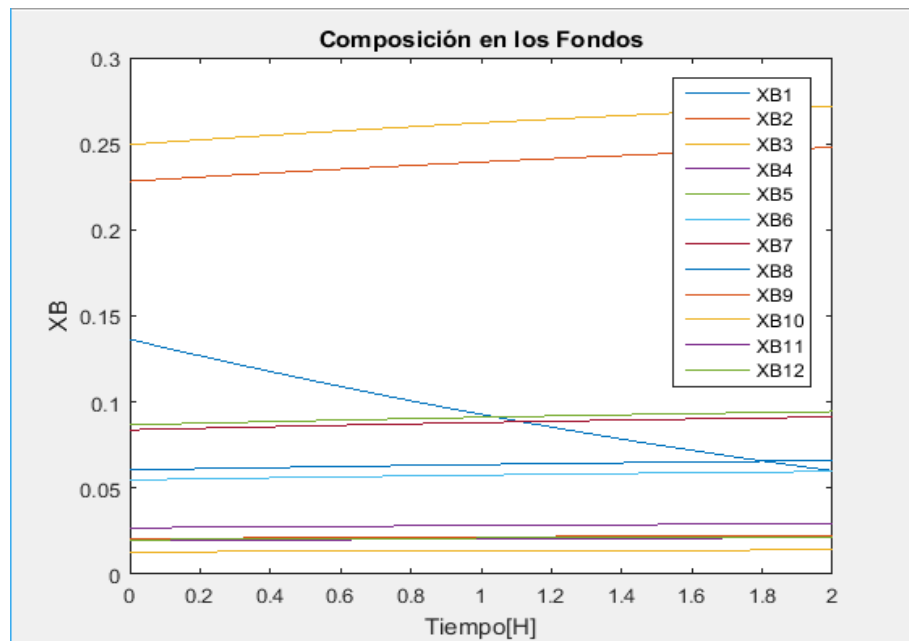
Composición de Fondos NP=40.



Nota: Composición Molar a T=2h.

**Figura 24.**

*Composición de Fondos NP=50.*



*Nota:* Composición Molar a T=2h.

#### **4.5.4 Composición del destilado**

En la Figura 25, se observa la composición de destilado del componente clave ligero (N-Butano) para las dos evaluaciones. La composición de Butano recuperado es de 99.9%.

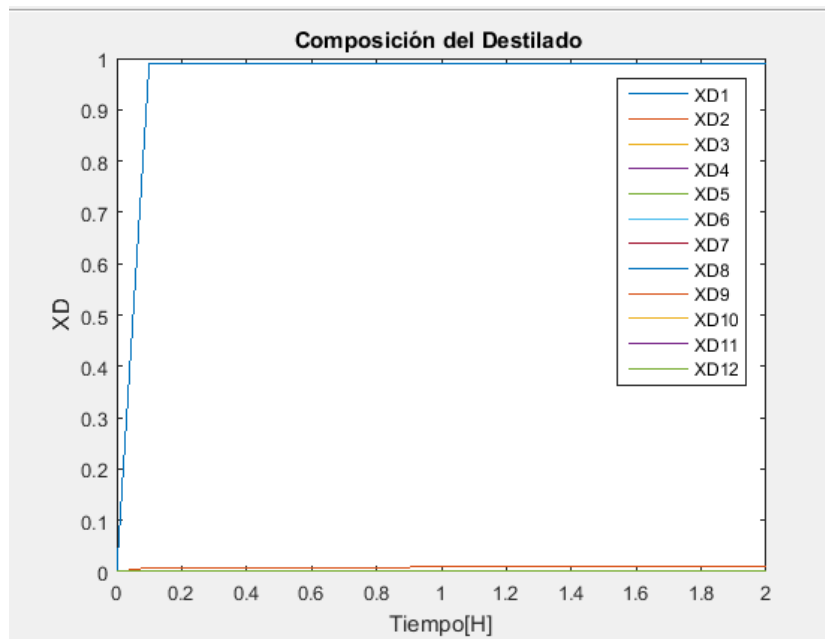
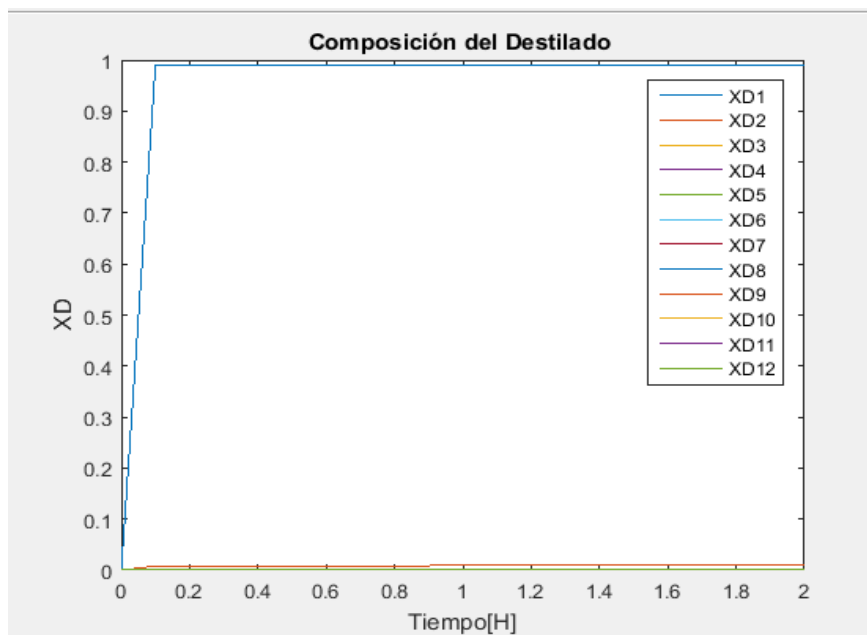
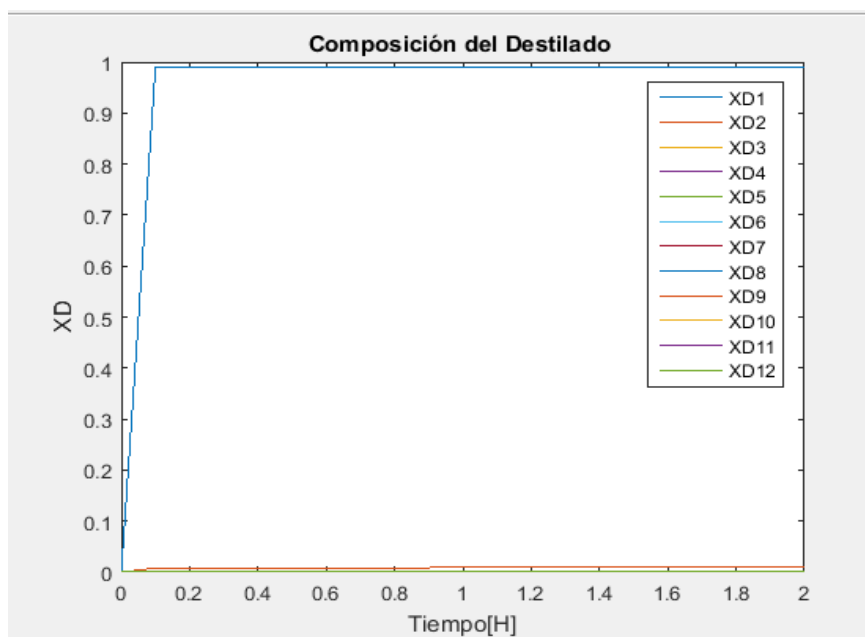
**Figura 25.***Composición Molar del destilado a NP=30.**Nota: Composición del destilado a NP=30***Figura 26.***Composición del destilado a NP=40.**Nota: Composición del destilado a NP=40*

Figura 27.

Composición del destilado a NP=50.



Nota: Composición del destilado a NP=50

Tabla 8.

Parámetros calculados a partir del modelamiento

Elemento	Evaluación 1	Evaluación 2	Evaluación 3
NP	30	40	50
Tiempo (H)	2	2	2
Alimentación (Kmol)	200	200	200
Remante Total (Kmol)	184.815	183.833	183.5275
Destilado Total (Kmol)	10.515	10.947	11.0929
Número Mínimo (Nmin)	12.7601-14.478	12.7601-14.6522	12.7601-14.7103
Reflujo (R)	9.7302-19.923	8.9685-19.0962	8.7684-18.8325
Reflujo Mínimo (Rmin)	8.7523-16.9468	8.7523-18.1638	8.7523-18.6155
XB1	0.0665	0.0617	0.0601
XD1	0.99	0.99	0.99
$\phi$	1.3632-1.4332	1.3632-1.4385	1.3632-1.4403

Nota: Parámetros determinados por las ecuaciones de modelamiento.

#### 4.5.5 Simulación del proceso de destilación Batch

Las condiciones iniciales planteadas en capítulos anteriores son ingresadas al simulador que determina el valor de su composición además del reflujo calculado, flujos remanentes, destilado para cada intervalo de tiempo.

#### Figura 28.

*Condiciones de salida de la columna Batch.*

Flow rates in kmol				
N-Butane	27.2732	1.0901	26.1832	0.5451
I-Pentane	45.6456	0.0000	45.6456	0.0000
N-Pentane	49.9054	0.0000	49.9055	0.0000
Cyclopentane	5.3855	0.0000	5.3855	0.0000
2-Methylpentane	17.3476	0.0000	17.3476	0.0000
3-Methylpentane	10.9562	0.0000	10.9562	0.0000
N-Hexane	16.7649	0.0000	16.7649	0.0000
Methylcyclopenta	12.1208	0.0000	12.1208	0.0000
Cyclohexane	4.1248	0.0000	4.1248	0.0000
2-Methylhexane	2.5875	0.0000	2.5875	0.0000
Trans-1,2-Dimeth	3.8918	0.0000	3.8918	0.0000
N-Heptane	3.9968	0.0000	3.9968	0.0000

*Nota:* Condiciones de Salida para el intervalo de tiempo.

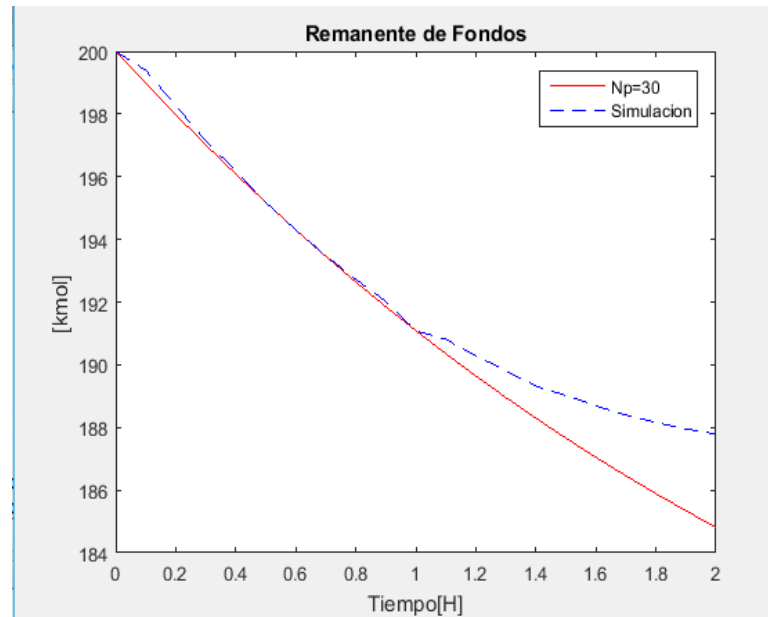
#### 4.6. Comparación de resultados

Los resultados obtenidos por las ecuaciones del modelo matemático establecidas por: (Narvaéz García, Zabala Loría, Rocha Uribe, & Rubio Atoche, 2013), son comparadas con un simulador, cuando existe flujo de vapor que varía a lo largo de la columna.

#### 4.6.1 Remanentes de los fondos

**Figura 29.**

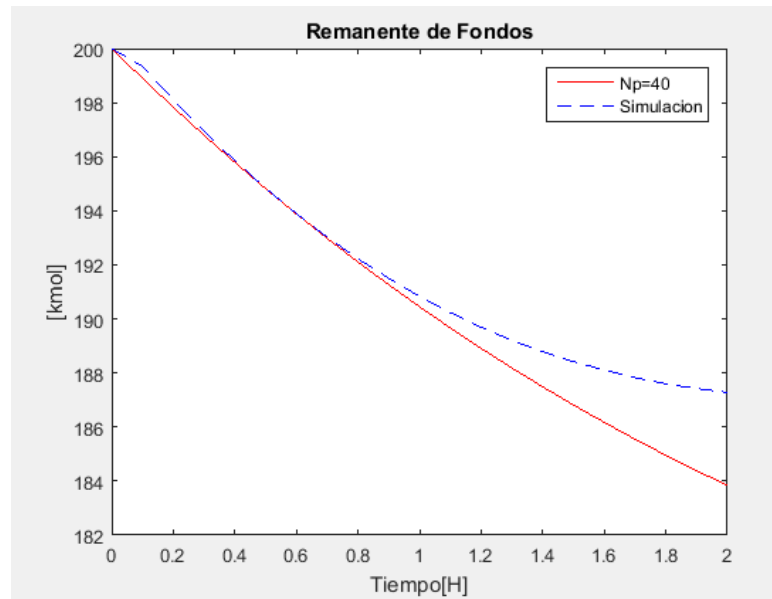
*Variación del Remanente de los fondos para NP=30.*



En la Figura 29, se observa una comparación entre el remanente de los fondos calculado a 30 platos, el remanente obtenido por el simulador que arroja un 1% de error en 1 hora de operación. Con tendencia al incremento a partir de la hora restante. En la Figura 30, se observa el remanente de los fondos calculados por el modelo matemático en comparación con los obtenidos por el simulador con la misma tendencia

**Figura 30.**

Variación del Remanente de los fondos para  $NP=40$ .

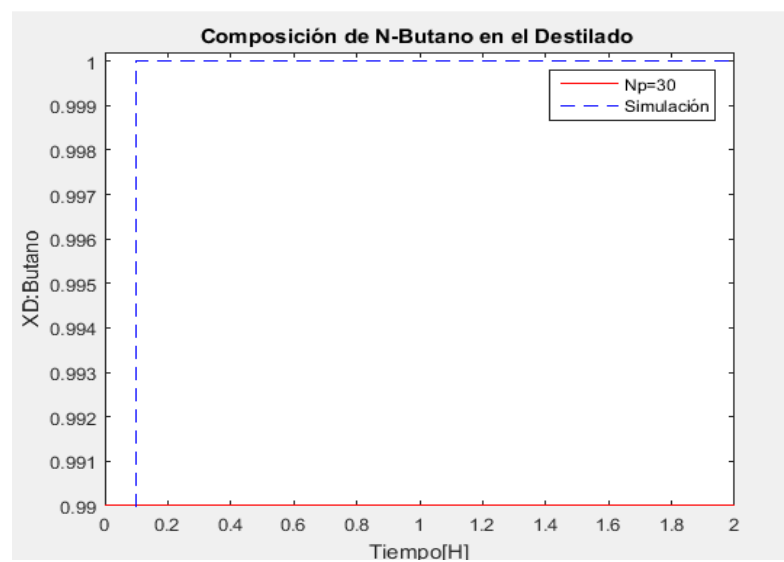


#### 4.6.2 Comparación de Componente en el destilado

En la Figura 31 y Figura 32 se observa los cambios de concentración en destilado para 30 y 40 platos evaluados respectivamente

**Figura 31.**

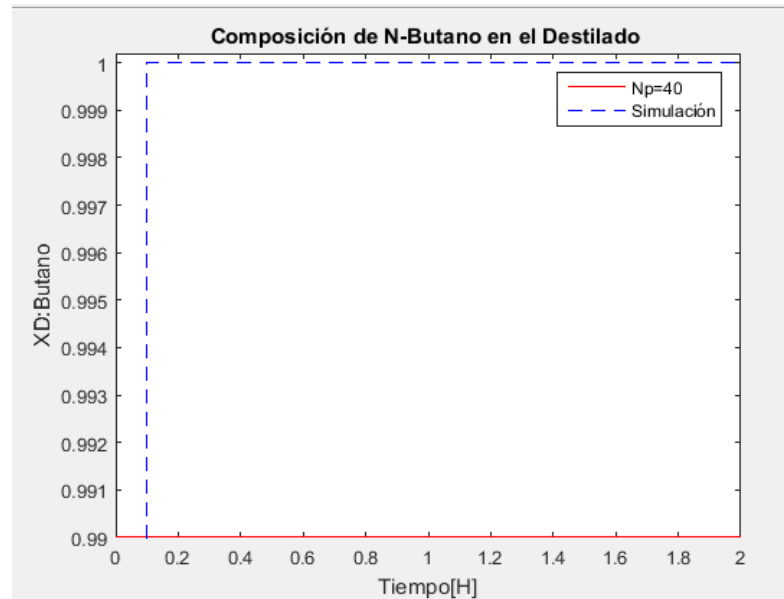
Comparación del componente  $lk$  en destilado  $NP=30$ .





**Figura 32.**

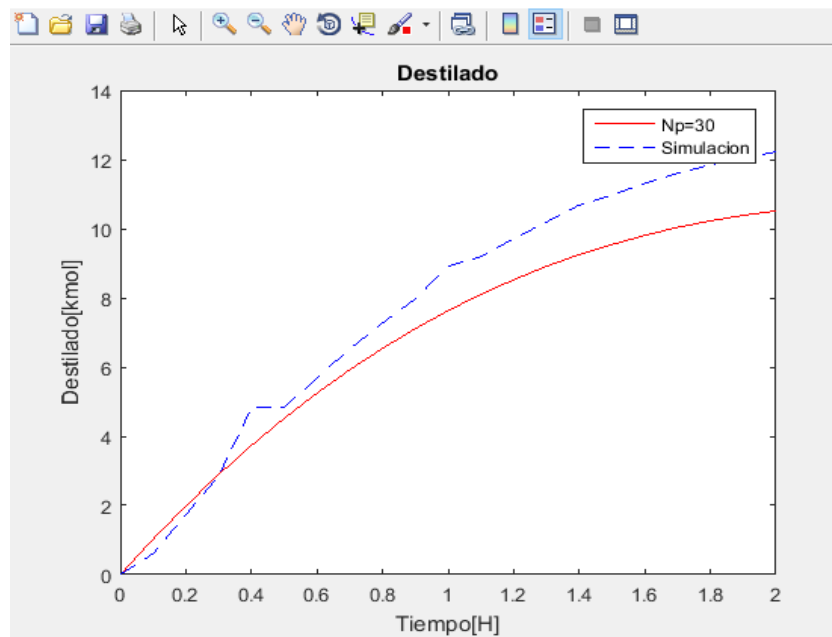
*Comparación del componente  $lk$  en destilado  $NP=40$ .*



#### 4.6.3 Comparación del del flujo de destilado

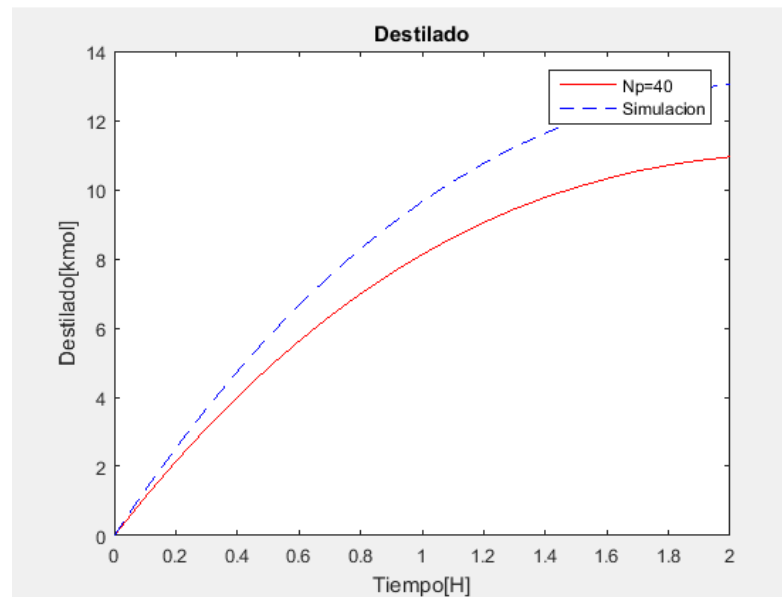
**Figura 33.**

*Comparación del flujo de destilado a  $NP=30$ .*



**Figura 34.**

*Comparación del destilado a NP=40.*



En la comparación de las evaluaciones mostradas se visualizó una desviación significativa de la curva de modelamiento con la curva de simulación; al ingresar los datos de reflujo calculados en la plataforma de simulación esta no considera el flujo de vapor durante toda la columna, el reflujo tiende a variar en toda la columna como se aprecia en la Figura 35, demostrando un comportamiento real de la mezcla y variando su temperatura .

Según (Narvaéz García, Zabala Loría, Rocha Uribe, & Rubio Atoche, 2013), para estos casos donde el comportamiento de la mezcla sea no ideal es necesario trabajar con ecuaciones que permita representar la no idealidad como: las ecuaciones de estado de Wilson, NTRL, etc.

**Figura 35.**

*Datos de comparaciones.*

22	-0.2	760.00	117.60	130.14
23	-0.2	760.00	117.60	130.14
24	-0.2	760.00	117.60	130.14
25	-0.2	760.00	117.60	130.14
26	-0.2	760.00	117.60	130.14
27	-0.2	760.00	117.60	130.14
28	-0.2	760.00	117.60	130.14
29	-0.2	760.00	117.59	130.14
30	-0.2	760.00	117.59	130.14
31	-0.2	760.00	117.57	130.13
32	-0.2	760.00	117.53	130.12
33	-0.1	760.00	117.42	130.08
34	0.1	760.00	117.11	129.97
35	0.5	760.00	116.28	129.66
36	1.8	760.00	114.22	128.82
37	4.8	760.00	110.15	126.77
38	11.0	760.00	104.31	122.70
39	20.6	760.00	97.46	116.86
40	33.5	760.00		110.00

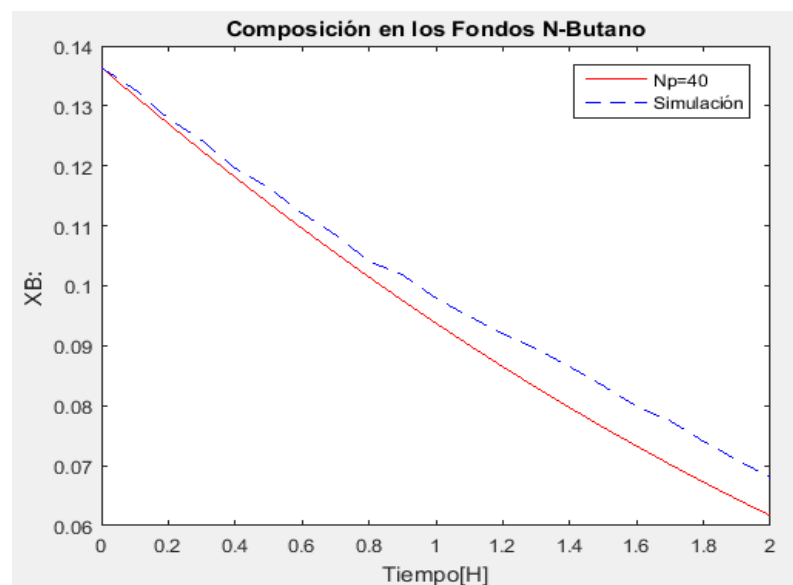
*Nota:* Resultados a 0.1 h y reflujo de 9.7374

#### **4.6.4 Comparación de resultados a flujo de vapor constante**

A flujo de vapor constante a 110 Kmol/h, se obtuvo los parámetros de composición de componentes clave ligero con un error máximo de 9.254% en composición de los fondos para el componente clave ligero (N-Butano).

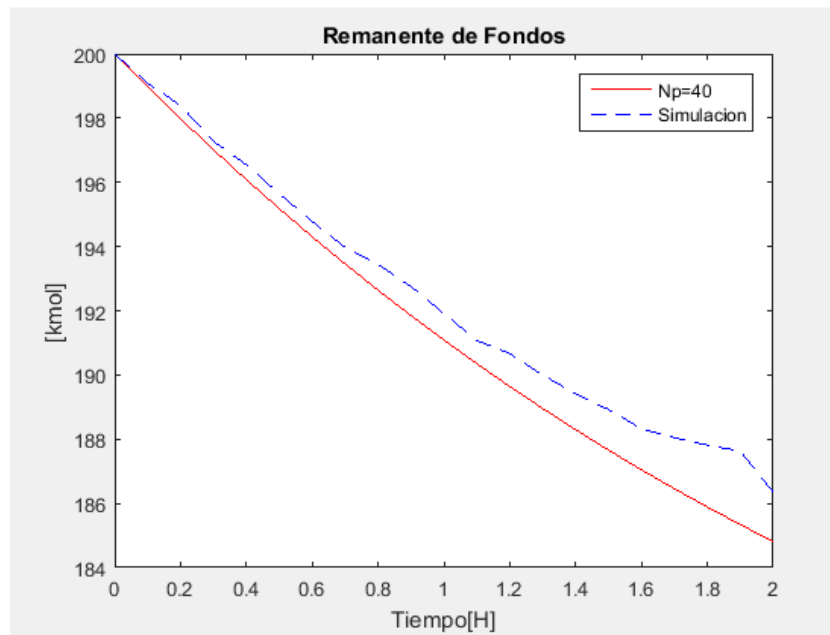
**Figura 36.**

*Composición en los fondos componente lk.*



**Figura 37.**

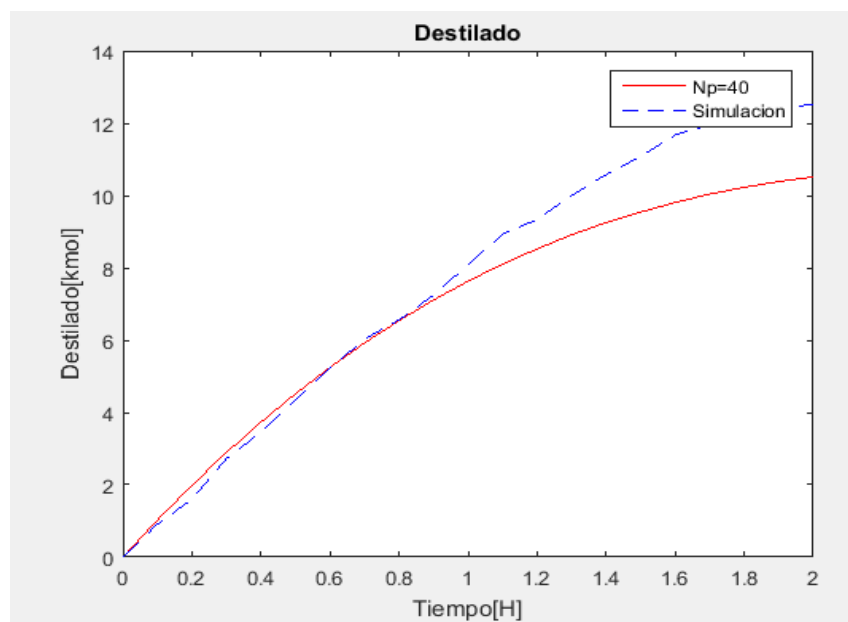
*Remanente de los fondos a flujo de vapor:*



*Nota:* Remanente de salida del simula 186.35 Kmol/h.

**Figura 38.**

*Flujo de destilado.*



## Capítulo V

### 5. Conclusiones y recomendaciones

#### 5.1. Conclusiones

- Al realizar el modelamiento de las ecuaciones que representan el comportamiento de una columna de destilación Batch por métodos cortos, se puede evidenciar que los parámetros utilizados para la representación son menores en comparación con otros métodos más complejos que establecen diferentes condiciones para su representación.
- Al realizar las pruebas con la función programada en Matlab para el cálculo del número mínimo de etapas se obtuvo un tiempo de respuesta menor a comparación con la función Newton Raphson preestablecida por Matlab.
- Luego de haber realizado las pruebas se determinó que en la columna de destilación Batch con 30 platos presentó una relación de reflujo de 19.923 a un número mínimo de etapas de 14.478, con un flujo de destilado de 10.515 kmol y un remanente en los fondos de 184.815 kmol; asimismo, se determinó que una columna de destilación Batch con 40 platos requiere un reflujo de 19.0962 a un número de etapas mínimas de 14.6522, con un flujo de destilado de 10.947 kmol y un remanente en los fondos de 183.833 kmol; y al incrementar el número de platos de una columna de destilación Batch a 50 el reflujo es de 18.8325, el número mínimo de etapas es de 14.7103, al comparar las evaluaciones se concluye que a un mayor número platos, la columna de destilación Batch se necesita un menor reflujo con un mayor su número mínimo de etapas al culminar el tiempo de operación.
- Al comparar las composiciones de salida del componente clave ligero en los fondos de todas las evaluaciones realizadas, se determina que, a un

mayor número de etapas las composiciones de los fondos son menores, con un mayor flujo de recuperación del componente clave ligero de la mezcla.

- La resolución del modelo matemático que involucró programación para el proceso de destilación Batch para una mezcla multicomponente, permite determinar los resultados con un margen de error menor al 10%, siendo el factor determinante el flujo de vapor.

## **5.2. Recomendaciones**

- Se recomienda crear funciones de cálculo para cada una de las ecuaciones que representan el algoritmo de método corto dentro del programa, ya que el proceso es interactivo y repetitivo a fin de simplificar las líneas de código.
- Se recomienda validar el modelo matemático con volatilidades relativas variables ya que en una columna de destilación Batch real la existe variación de temperatura a lo largo de la columna de destilación para disminuir el porcentaje de error.
- Se recomienda realizar un modelo matemático de una columna de destilación Batch, para la recuperación de productos por la región intermedia de la columna.

## Bibliografía

- Angurell, I., Casamitjana, N., Caubet, A., Dinarés, I., Llor, N., Muñoz, D., . . . Velasco, D. (13 de Agosto de 2021). *Operaciones básicas en el laboratorio*. Recuperado el 13 de 08 de 2021, de [http://www.ub.edu/oblq/oblq%20castellano/destilacio\\_tipus.html](http://www.ub.edu/oblq/oblq%20castellano/destilacio_tipus.html)
- Bandyopadhyay, S. (2006). Extended Smoker's Equation for Calculating Number of Stages in Distillation. 1-8.
- Banka, S., & Dutta, S. (2016). Interactive Matlab Program for Design of Multicomponent Distillation Column using FUG Method. *International Journal on Advances in Engineering Technology and Science*, 2455-3131. Recuperado el 12 de 06 de 2021, de [https://www.researchgate.net/publication/317090602\\_Interactive\\_Matlab\\_Program\\_for\\_Design\\_of\\_Multicomponent\\_Distillation\\_Column\\_using\\_FUG\\_Method](https://www.researchgate.net/publication/317090602_Interactive_Matlab_Program_for_Design_of_Multicomponent_Distillation_Column_using_FUG_Method)
- Borgna, A., Di Cosino, J., & Fígoli, N. (2001). *Petróleo y gas natural Reservas, procesamiento y usos*. Santa Fe, Argentina: Centro de publicaciones, UNL.
- Cerda, J., & Westerberg, A. W. (1981). Shortcut Methods for Complex Distillation Columns. 1. Minimum. 1-12.
- Domínguez Hernández, G., Sánchez Bazán, I., Osorio Mirón, A., González Landero, G. E., Sánchez Bazán, L. A., & Hernández Aguilar, E. (2011). Interfaz Gráfica Computacional para Destilación Multicomponente utilizando Métodos Cortos. *Nexo*, 7.
- Forziati, A. F., Norris, W. R., & Rossini, F. D. (1949). Vapor Pressures and Boiling Points of Sixty API-NBS. *U. S. Department of Commerce National Bureau of Standards*, 555-563. Recuperado el 01 de 07 de 2021, de [https://nvlpubs.nist.gov/nistpubs/jres/43/jresv43n6p555\\_A1b.pdf](https://nvlpubs.nist.gov/nistpubs/jres/43/jresv43n6p555_A1b.pdf)
- Gadalla, M., Jobson, M., & Smith, R. (2003). Shortcut models for retrofit design of distillation columns. 1-16.
- García García, C., & González Ponce, M. (2014). Desarrollo de un algoritmo en matlab para el diseño de columnas de destilación por el método de Fenske-Underwood-Gilliland. *Jóvenes en la Ciencia*, 1-6.
- Gil C., I. D., Guevara L., J. R., García Z., J. L., & Leguizamón R., A. (2011). *Análisis y simulación de procesos en Ingeniería Química*. Bogotá: Universidad Nacional De Colombia.
- Himmelblau, D. M. (1997). *Principios Básicos y Cálculos en Ingeniería Química*. México: Prentice-Hall.
- Jiménez Gutierrez, A. (2003). *Diseño de procesos en ingeniería química*. Celaya: Reverté.

- Krell, E. (1982). *Handbook of Laboratory Distillation with an Introduction to Pilot Plant Distillation*. Berlin: Elsevier.
- McCabe, W. L., Smith, J. C., & Harriot, P. (2001). *Operaciones Unitarias en Ingeniería Química*. Mexico: McGraw-Hill.
- Moran, M. J., & Shapiro, H. N. (2004). *Fundamentos de la Termodinámica*. Barcelona: Reverté.
- N.García, A., Z. Loría, J. C., R.Marín, A., & C.Quiroz, A. V. (2014). Simple Multicomponent Batch Distillation Procedure with a variable reflux policy. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 1-12.
- Narvaéz García, A., Zabala Loría, J. C., Rocha Uribe, A., & Rubio Atoche, C. (2013). Método corto para la destilación discontinua multicomponente considerando una política de reflujo variable. *Revista Mexicana de Ingeniería Química*, 17.
- Narvaéz García, A., Zavala Loría, J. C., Ruíz Marín, A., & Canedo López, Y. (2017). Short-Cut Methods for Multicomponent Batch Distillation. *Intech*, 1-26.
- Narvaéz García, A., Zavala Loria, J., Vilchiz Bravo, L. E., & Rocha Uribe, A. (2014). Performance indices to design a multicomponent batch distillation column using a shortcut method. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 1-14.
- Perdomo Hurtado, F. A. (2007). *Diseño conceptual y simulación de columnas de destilación reactiva implementando termodinámica topológica a condiciones finitas de operación*. Manizales.
- Richardson, J. F., Harker, J. H., & Backhurst, J. R. (2002). *Chemical Engineering Particle Technology and separation processes* (Quinta ed., Vol. 2). Oxford: Elsevier.
- Rolle, K. C. (2006). *Termodinámica*. Mexico: Pearson.
- Rousseau, R. W. (1987). *Handbook of Separations Process Technology*. Canada: Wiley.
- Sánchez Mares, F. (2006). Aplicación de método corto de punto de burbuja en el diseño de columnas de destilación. *Conciencia Tecnológica*, 1-5.
- Semplades. (22 de septiembre de 2017). *planificacion.gob.ec*. Recuperado el 22 de 07 de 2021, de [https://www.planificacion.gob.ec/wp-content/uploads/downloads/2017/10/PNBV-26-OCT-FINAL\\_0K.compressed1.pdf](https://www.planificacion.gob.ec/wp-content/uploads/downloads/2017/10/PNBV-26-OCT-FINAL_0K.compressed1.pdf)
- Semplades. (13 de Julio de 2017). *www.gobiernoelectronico.gob.ec*. Recuperado el 22 de 07 de 2021, de <https://www.gobiernoelectronico.gob.ec/wp-content/uploads/downloads/2017/09/Plan-Nacional-para-el-Buen-Vivir-2017-2021.pdf>
- Sinche A., D. F. (2012). *Caracterización Físico-Química de naftas producidas en la Refinería Estatal de Esmeraldas, mediante cromatografía de gases*. Quito.



- Smith, J. M., Van Ness, H. C., & Abbott, M. (1997). *Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química*. Mexico: McGraw-Hill.
- Soave, G., & Coto, B. (2007). SRK, después de muchos años -¿Qué se puede mantener y qué se puede cambiar? *Real Sociedad Española de Química*, 1-8.
- Speight, J. G. (2001). *Handbook of Petroleum Analysis*. Canada: Wiley-Interscience.
- Sundaram, S., & Evans, L. (1993). Shortcut Procedure for Simulating Batch Distillation Operations. 1-8.
- Sundaran, S., & Evans, L. (1993). Synthesis of Separations by Batch Distillation. 1-11.
- Treybal, R. E. (1981). *Mass Transfer Operations*. McGraw-Hill.
- Yaws, C. L. (2015). *The yaws handbook of vapor pressure*. Oxford: Elsevier.  
Recuperado el 03 de 07 de 2021, de  
<https://books.google.com.ec/books?id=MevHBQAAQBAJ&printsec=frontcover&hl=es#v=onepage&q&f=false>
- Zabaleta Mercado, R. (2010). Determinación de constantes óptimas para a ecuación de estado Peng-Robinson Stryjec-Vera(PRSV) a presiones elevadas. 1-21.

**Anexos**