

# CALCULOS EN DESTILACION CONTINUA PARA SISTEMAS BINARIOS UTILIZANDO HOJA DE CALCULO EXCEL

**M. Otiniano.**

Departamento de Operaciones Unitarias.  
Facultad de Química e Ingeniería Química.  
Universidad Nacional Mayor de San Marcos.  
Ciudad Universitaria s/n, Lima 1, Perú.  
[motinianoc@unmsm.edu.pe](mailto:motinianoc@unmsm.edu.pe)

Se presenta una solución numérica del método matemático y gráfico de McCabe-Thiele para encontrar el número teórico de etapas necesarios para separar por medio de la destilación continua sistemas binarios utilizando la Hoja de Cálculo Excel.

En la destilación continua de mezclas binarias, se necesita calcular el número de platos teóricos necesarios para lograr la separación deseada con una relación de reflujo dada y calcular los límites de la operación como el reflujo total y el reflujo mínimo.

Dichos cálculos se hacen por lo general por métodos gráficos entre los cuales tenemos: el método Ponchon-Savarit llamado de concentración-entalpía, que es un método riguroso que requiere de datos detallados de entalpía para poderse aplicar y método McCabe-Thiele, que es un método menos riguroso que el anterior y que sólo utiliza las relaciones de equilibrio y el balance de materia para poderse aplicar.

Los métodos gráficos tienen el inconveniente de que al ser hechos a mano consumen mucho tiempo y son ciertamente inexactos. Por otro lado se pueden hacer dichos cálculos utilizando alguno de los programas de comerciales para simulación de procesos químicos los cuales son costosos para obtener las licencias para su utilización. Por esto en el presente trabajo se presenta una alternativa de realizar los cálculos para destilación continua de mezclas binarias tanto ideales y no ideales por el método propuesto por McCabe-Thiele utilizando la Hoja de Cálculo Excel. La propuesta consiste en encontrar una solución numérica y gráfica del método de McCabe-Thiele para determinar el número de platos teóricos, la composición de cada plato teórico, el reflujo total, el reflujo mínimo y la posición del plato de alimentación.

El método propuesto es sencillo de utilizar y puede ser usado como un estimado preliminar del diámetro, altura de la columna, el número de etapas, el consumo de energía, las dimensiones del hervidor y condensador a utilizarse para una separación dada.

## INTRODUCCION

La destilación es la operación de separación más antigua y la operación unitaria más ampliamente utilizada en la industria <sup>1</sup>. La destilación utiliza un principio de separación muy simple: un contacto íntimo se da entre la mezcla inicial y una segunda fase para mejorar una transferencia de masa efectiva entre esas dos fases. Las condiciones termodinámicas son escogidas de tal manera que el constituyente a ser separado de la mezcla inicial pasa a la segunda fase. Las fases son subsecuentemente separadas en dos fases simples con diferentes composiciones.

Tres etapas están involucradas en la implementación de cualquier proceso de separación:

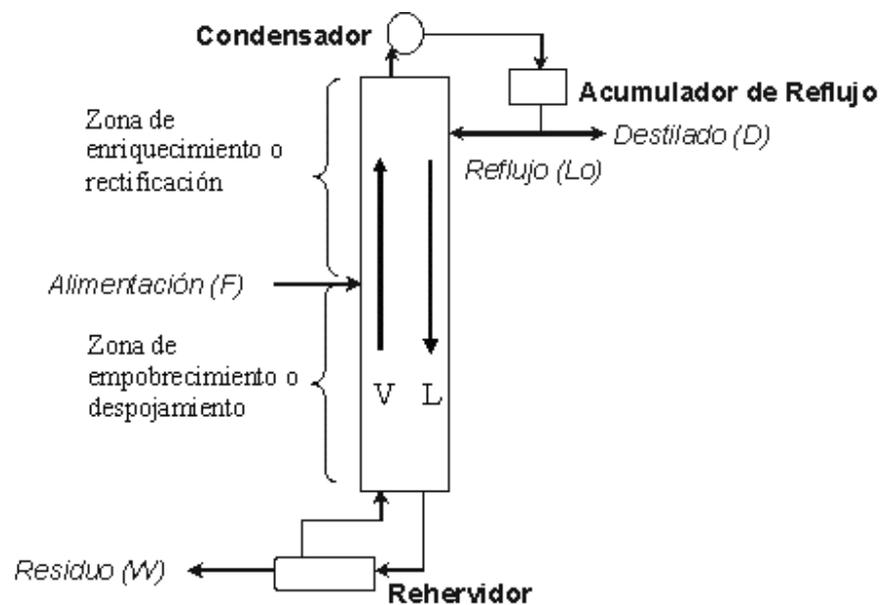
- Creación de un sistema de dos fases.
- Transferencia de masa entre las fases.
- Separación de las fases.

En la destilación la segunda fase es generada por vaporización parcial de la alimentación líquida, por lo cual dicha segunda fase difiere de la mezcla original. Por esto la destilación requiere energía en la forma de calor que puede ser subsecuentemente ser fácilmente removida del sistema.

La destilación continua o fraccionamiento es una operación de destilación de múltiples etapas y en contracorriente. Para una mezcla de dos componentes volátiles llamada binaria, con ciertas excepciones, es posible separar mediante este método dicha mezcla en sus componentes, recuperando cada uno en el estado de pureza que se desee.

En la práctica industrial la separación de dos componentes volátiles por lo general se realiza con una columna de destilación como la que se muestra en la figura 1. La alimentación se introduce de manera continua en algún punto intermedio de la columna. El calor que se introduce al rehervidor por la parte baja de la columna vaporiza una parte del líquido. Este vapor asciende por la columna debido a que su densidad es menor que la del líquido que desciende. Se proporcionan platos en la columna para permitir el contacto íntimo del vapor y del líquido. Estos platos pueden tener varias configuraciones, pero en nuestro caso lo que nos interesa es que permiten al líquido fluir hacia abajo, a través de la columna, y al vapor ascender por la misma, realizando de este modo un mezclado y una separación en cada plato. El vapor que entra a un plato desde el plato de abajo se encuentra

a una temperatura más alta que el líquido que desciende a ese plato desde el plato de arriba. El vapor se enfriará lentamente, con alguna condensación que ocurra de los componentes más pesados; en el caso del líquido, éste se calentará con alguna vaporización correspondiente a los componentes más ligeros. Finalmente, en la parte superior de la columna, el vapor que abandona el plato superior de la columna entra al condensador, donde el calor se remueve por enfriamiento con agua o algún otro medio de enfriamiento. Una parte del líquido que se condensa regresa a la columna como reflujo líquido ( $L_0$ ) y el líquido restante se convierte en el producto destilado ( $D$ )<sup>2</sup>.



**Figura 1. Esquema de la columna de destilación continua**

En la destilación continua de mezclas binarias ideales, se necesita calcular el número de platos teóricos necesarios para lograr la separación deseada con una relación de reflujo dada (relación de reflujo =  $L_0/D$ ) y también calcular los límites de la operación los cuales son:

**Número mínimo de platos o Reflujo total:** que es el número mínimo de etapas necesarias para llevar a cabo la separación que se especifique.

**Reflujo mínimo:** es la relación máxima que requerirá de un número infinito de platos para lograr la separación deseada.

Los métodos gráficos tienen el inconveniente de que al ser hechos a mano consumen mucho tiempo y son ciertamente inexactos. Por otro lado se pueden hacer dichos

cálculos utilizando alguno de los programas de comerciales para simulación de procesos químicos los cuales son costosos para obtener las licencias para su utilización. Por esto en el presente trabajo se presenta una alternativa de realizar los cálculos para destilación continua de mezclas binarias ideales por el método propuesto por McCabe-Thiele utilizando la Hoja de Cálculo Excel. La propuesta consiste en encontrar una solución numérica del método de McCabe-Thiele para determinar:

- el número de platos teóricos para una mezcla dada,
- calcular la composición de cada plato teórico,
- el reflujo total ,
- el reflujo mínimo y
- la posición del plato de alimentación.

### **PROCEDIMIENTO PROPUESTO**

En la Hoja de Cálculo se ha introducido una base de datos de diversos componentes con sus respectivas constantes para la ecuación de Antoine, las que se utilizan para calcular la presión de vapor de cada componente puro:

$$P_v = 10^{A-(B/(T+C))} \quad (1)$$

$P_v$  es la presión de vapor del componente puro, y las constantes A,B,C son características para cada compuesto y T es la temperatura en grados centígrados. Se puede seleccionar los componentes a ser separados en una columna de destilación y automáticamente también se carga en otra parte de la hoja de cálculo las constantes correspondientes.

Considerando que son mezclas de soluciones ideales se utilizará la ley de Raoult, que es una ley ideal para determinar las fases vapor-líquido en equilibrio:

$$p_A = P_A x_A \quad (2)$$

Donde  $p_A$  es la presión parcial del componente A en el vapor,  $P_A$  es la presión de vapor de A puro y  $x_A$  es la fracción molar de A en la fase líquida.

Para los cálculos de los datos de vapor y líquido en equilibrio se utiliza el procedimiento de cálculo del punto de burbuja para una presión de 1 atm con las siguientes ecuaciones:

$$P = p_A + p_B \quad (3)$$

$$P = P_A x_A + P_B (1-x_A) \quad (4)$$

$$y_A = P_A x_A / P \quad (5)$$

P es la presión total del sistema,  $p_B$  es la presión parcial del componente B en el vapor,  $P_B$  es la presión de vapor de B puro y finalmente  $y_A$  es la fracción molar de A en la fase vapor.

Una vez calculados los datos de vapor y líquido en equilibrio se procederá a graficar los datos en un diagrama de vapor(y) y líquido (x) en equilibrio para obtener las líneas de tendencia tanto  $y = f(x)$  como  $x = f(y)$ , a partir de los cuales se obtienen los coeficientes de las líneas de tendencia, que serán cargados en otra parte de la hoja de cálculo.

El cálculo del número teórico de etapas se hace por medio de la línea de operación de la sección de enriquecimiento donde se relaciona la composición del vapor en función de la composición del líquido a lo largo de la sección:

$$y_{n+1} = \frac{R}{R+1} x_n + \frac{x_D}{R+1} \quad (6)$$

R es la relación de reflujo constante que es fijada, n es el plato teórico,  $x_D$  es la concentración molar del componente más volátil en el destilado, x es la composición del líquido en el plato, finalmente y es la composición del vapor en el plato.

Para determinar los efectos de las condiciones de la alimentación se utiliza:

$$y = \frac{q}{q-1} x - \frac{x_F}{q-1} \quad (7)$$

Donde  $x_F$  es la concentración molar del componente más volátil en la alimentación. El valor de q depende de las condiciones de entrada de la alimentación así si entra como vapor saturado  $q = 0$ , si entra como líquido en su punto de ebullición  $q = 1$ , si la alimentación es líquida en frío  $q > 1$ , y cuando la alimentación es en parte líquida y en parte vapor,  $0 < q < 1$ .

La línea de operación de la sección de enriquecimiento (ecuación 6) se intersecta con la línea de las condiciones de alimentación (ecuación 7), con lo cual se puede establecer conjuntamente con la concentración del componente más volátil en el residuo la línea de operación de la sección de empobrecimiento. Con ambas líneas de operación determinadas, se calculan las concentraciones del líquido y vapor en cada uno de los platos teóricos. Se procede a construir la gráfica escalonada de los platos teóricos desde la concentración del destilado ( $x_D$ ) hasta la concentración del residuo ( $x_w$ ) con lo que se cuenta el número de platos teóricos necesarios para realizar la separación deseada. La intersección de ambas

líneas de operación con la línea de las condiciones de alimentación se localiza el plato de entrada de la alimentación como lo muestra la figura 2.

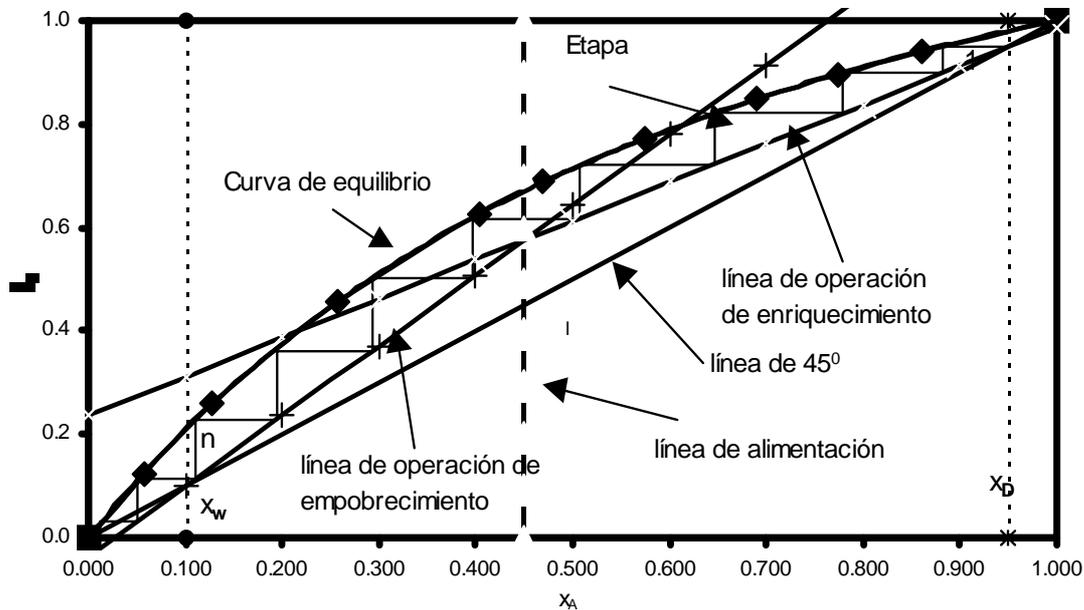


Figura 3. Diagrama McCabe-Thiele

El programa cuenta también con un procedimiento numérico alternativo para contar el número de platos teóricos utilizando las condiciones de alimentación, de operación de la columna y la función SI.

El reflujo total que es el número mínimo de platos que se puede utilizar para obtener cierta separación. En este caso, tanto la línea de operación de la sección de enriquecimiento y la de empobrecimiento coinciden con la línea diagonal de 45°, con lo cual se calculan las concentraciones de los platos, las cuales son graficadas en forma escalonada, y se puede contar la cantidad de platos necesarias. En la práctica, esta condición se puede lograr si se regresa el vapor condensado de la parte superior de la torre en forma de reflujo y el líquido de los residuos se pasa al hervidor.

El reflujo mínimo es el número infinito de platos para una separación dada, esto corresponde a un flujo mínimo de vapor en la torre de destilación, y por tanto, a dimensiones mínimas del hervidor y condensador. De acuerdo al método, cuando las líneas de operación de enriquecimiento y empobrecimiento se intersectan con la línea de equilibrio en un punto  $(x', y')$  donde el número de etapas requeridas se vuelve infinita.

$$\frac{q}{q-1} = \frac{y' - y_F}{x' - x_F} \quad (8)$$

Todos los valores son conocidos a excepción de  $x'$  y de  $y'$ , entonces se utiliza un procedimiento iterativo donde se supone un valor  $x'$ , con el cual se calcula el valor de  $y'$  por medio de la ecuación de la curva de tendencia correspondiente. Se reemplazan en la ecuación anterior con el objetivo de encontrar los valores que resuelvan dicha ecuación. El reflujo mínimo ( $R_m$ ) se calcula con los valores obtenidos del procedimiento anterior:

$$\frac{R_m}{R_m + 1} = \frac{x_D - y'}{x_D - x'} \quad (9)$$

### **EJEMPLO DE APLICACION**

Se desea destilar una mezcla líquida de benceno(A)-tolueno(B) en una torre de destilación a 1 atm de presión total. La alimentación es de 100 moles por hora y su composición es 45 % mol de benceno y 55 % mol de tolueno. Se desea obtener un destilado que contenga 95% mol de benceno y 5 % mol de tolueno y un residuo que contenga 10% mol de benceno y 90 % mol de tolueno.

Calcular:

- a) Reflujo total.
- b) Reflujo mínimo.
- c) El número de platos teóricos para una relación de reflujo de 4:1 y un valor  $q$  de 1.195 (mezcla de líquido + vapor).
- d) El plato donde se introduce la alimentación.

### **SOLUCION:**

El componente más volátil en esta mezcla es el benceno, por lo que se calcula las composiciones del vapor y del líquido en equilibrio para el sistema benceno (A)-tolueno (B) utilizando el método del punto de burbuja con la presión total de 760 mm Hg. Los resultados se muestran en la siguiente tabla.

**Tabla 1.** Datos de equilibrio sistema benceno-tolueno

T(°C)	P <sub>v</sub> (A) (mm Hg)	P <sub>v</sub> (B) (mm Hg)	P <sub>TOTAL</sub> (mm Hg)	x <sub>A</sub>	y <sub>A</sub>
80.1	759.96	292.22	760.00	1.00	1.00
83.0	830.24	322.66	760.00	0.86	0.94
85.0	881.59	345.11	760.00	0.77	0.90
87.0	935.39	368.78	760.00	0.69	0.85
90.0	1020.84	406.74	760.00	0.58	0.77
93.0	1112.23	447.75	760.00	0.47	0.69
95.0	1176.60	476.88	760.00	0.40	0.63
100.0	1350.11	556.34	760.00	0.26	0.46
105.0	1542.66	645.97	760.00	0.13	0.26
108.0	1667.88	704.99	760.00	0.06	0.13
110.6	1782.55	759.52	760.00	0.00	0.00

Se grafican los valores de las fracciones molares de las composiciones del vapor (y) versus las fracciones molares de las composiciones del líquido en equilibrio (x) como se nota en la figura 3:

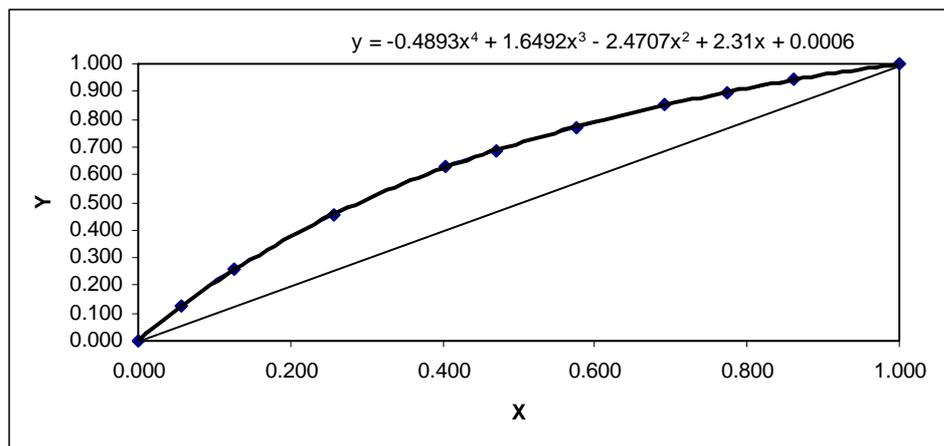


Figura 3. Diagrama de equilibrio líquido-vapor

Se determina luego las líneas de tendencia de la curva de equilibrio que son las siguientes:

$$y_A = -0.4893x_A^4 + 1.6492x_A^3 - 2.4707x_A^2 + 2.31x_A + 0.0006$$

a) Reflujo total.

Se introduce en la hoja de cálculo las especificaciones de la columna de destilación las condiciones de alimentación,  $x_F = 0.45$ , la composición del destilado,  $x_D = 0.95$  y la composición de los residuos  $x_w = 0.10$ .

En la celda para la relación de reflujo se coloca la letra T que significa reflujo total, con lo cual se logra que ambas líneas de operación coincidan con la línea de  $45^\circ$ . Con las concentraciones del benceno en el destilado ( $x_D$ ) y en el residuo ( $x_w$ ) así como las líneas de operación calcula las concentraciones de cada etapa, para luego graficar toda esa información con lo que se determina el número mínimo de platos directamente de la figura 4. El número de escalones es de 5.6 aproximadamente siendo el resultado obtenido por el método gráfico de  $5.8^3$ .

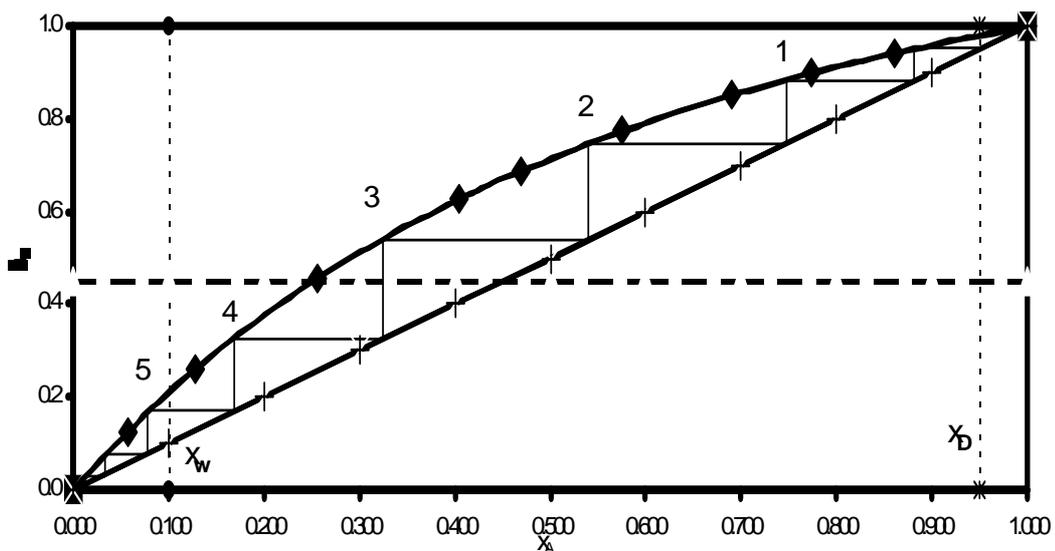


Figura 4. Diagrama de McCabe-Thiele para reflujo total

b) Reflujo mínimo.

Con el valor de  $q = 1.195$  y de  $x_F = y_F = 0.45$  se introducen dichos valores en la ecuación (6) para proceder al proceso iterativo mencionado, lo cual resulta en los siguientes valores de  $x' = 0.4919$  y de  $y' = 0.707$  con lo que de la ecuación (7) se obtiene un reflujo mínimo de 1.1325 que difiere del valor hallado por el método gráfico que fue de  $1.17^3$ .

c) El número de platos teóricos.

Se introduce la siguiente información:

- Reflujo dado de 4:1.
- $q = 1.195$ .
- La composición de la alimentación,  $x_F = 0.45$ .
- La composición del destilado,  $x_D = 0.95$  y
- La composición de los residuos  $x_w = 0.10$ .

Se introducen tales datos en la hoja de cálculo, con lo que se determina las líneas de operación y la línea de condiciones de alimentación, con lo que se calcula las composiciones de vapor y líquido en cada plato teórico a través de toda la columna, lo cual se grafica en el diagrama  $x$  versus  $y$ . En la figura 5 se nota los platos teóricos necesarios para las condiciones de separación y de relación de reflujo dadas, los cuales da un valor de 7.3 aproximado, mientras que el contador de etapas del programa nos da un valor de 7.56, siendo el valor reportado en el ejemplo resuelto por el método gráfico de 7.6<sup>3</sup>.

d) En la figura 5 la línea punteada gruesa representa a la ecuación de las condiciones de alimentación y que se intersecta con ambas líneas de operación, lo cual nos dará el plato donde entrará la alimentación que para nuestro caso es el plato número 5, que coincide con el valor hallado en el ejemplo resuelto por el método gráfico<sup>3</sup>.

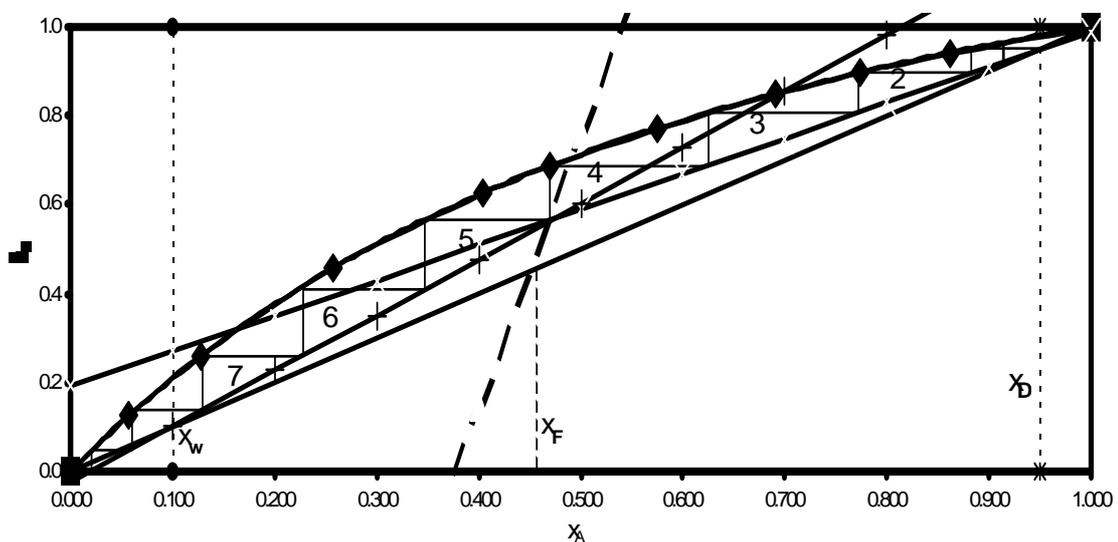


Figura 5. Diagrama McCabe-Thiele para determinar el número de platos teóricos

## CONCLUSIONES

Se ha elaborado un programa utilizando la Hoja de Cálculo Excel que realiza los cálculos necesarios para la separación por destilación continua de una mezcla binaria ideal

por el método gráfico matemático de McCabe-Thiele evitando realizar dichos cálculos por el método gráfico hecho a mano o el de utilizar un paquete comercial de simulación de procesos.

## **BIBLIOGRAFÍA**

1. J. Stichlmair , J. Fair . “Distillation”. Editorial Wiley-VCH, New York, 1998.
2. A. Hines , R. Maddox. “ Transferencia de Masa. Fundamentos y Aplicaciones”. Primera edición, Prentice-Hall Hispanoamericana S.A., México, 1984.
3. C. J. Geankoplis. “Procesos de Transporte y Operaciones Unitarias”. Tercera edición, Editorial CECSA, México, 1998.
4. R. Treybal. “Operaciones de Transferencia de Masa”. Tercera edición, McGraw-Hill, New York, 1980.