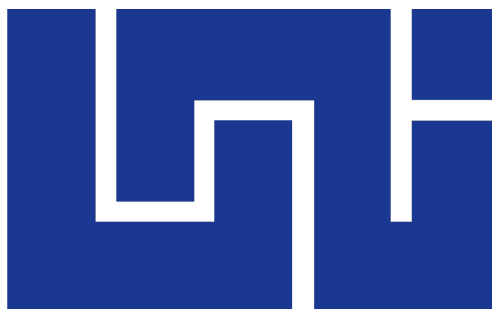


Universidad Nacional de Ingeniería

Dirección de Área de Conocimiento de Agricultura



Fenómenos de Transporte

**Diseño de una columna de destilación multicomponente para la
recuperación de gases ligeros del destilado de petróleo crudo**

Edson Alexander Cruz Vásquez

Erick Francisco Meléndez Lugo

Jorwin Manuel Navarrete Morales

Sergio Enrique Alvarez García

3T2 - IQ

15 de junio de 2025

Índice

Objetivos	5
Objetivo General	5
Objetivos Específicos	5
Introducción	6
Justificación	7
Marco Teórico	8
Introducción a los fenómenos de transporte	8
Fundamentos del transporte de masa	8
Fundamentos del transporte de energía	9
Fundamentos del transporte de momento	10
Interacción entre los fenómenos de transporte en procesos industriales	10
Desarrollo del Proyecto	12
Objeto de estudio	12
Análisis del objeto de estudio	13
Fundamentos teóricos	13
Sustancias de trabajo	14
Ficha técnica de la columna de destilación	15
Modelo matemático	18
Suposiciones fundamentales	19
Relaciones de equilibrio líquido-vapor	20
Temperatura de punto de burbuja	21
Número de platos reales y plato alimentado	22
Relación de reflujo óptima	25
Condiciones de frontera	27

Balance de momento	28
Preparación de los balances de masa y energía	32
Balance de masa	32
Balance de energía	34
Método de resolución del modelo matemático	37
Enfoque numérico para la resolución del modelo	37
Métodos numéricos empleados	39
Criterios de convergencia	40
Algoritmo de resolución	40
Resultados de la resolución del modelo matemático	45
Análisis de resultados	50
Análisis hidrodinámico	53
Número de Reynolds	53
Tiempos de Residencia	54
Validación de los resultados obtenidos	55
Perfil de Temperatura por etapa	56
Perfil de Presión por etapa	57
Flujo molar de líquido por etapa	58
Flujo molar de vapor por etapa	59
Perfil de composición Líquida por etapa en DWSIM	60
Perfil de composición Líquida por etapa en Python	61
Error relativo de composición líquida	62
Perfil de composición de vapor por etapa en DWSIM	63
Perfil de composición de vapor por etapa en Python	64
Error relativo de omposición de vapor	65
Densidad de vapor por etapa	66
Densidad del líquido por etapa	67

Tensión superficial por etapa	68
Velocidad de vapor	69
Justificación de errores relativos	69
Representación gráfica del equipo	72
Análisis económico	74
Costo del Casco	74
Costo de Platos Tamizados	75
Costo del Condensador Total	75
Costo del Rehervidor Parcial	76
Actualización y Costo Total Instalado	77
Inversión total	78
Impacto ambiental	79
Conclusión	80
Referencias	81

Objetivos

Objetivo General

- Diseñar una columna de destilación multicomponente a escala industrial, destinada a la recuperación de gases ligeros presentes en el destilado de petróleo crudo.

Objetivos Específicos

- Analizar el proceso de destilación multicomponente aplicando los principios de los fenómenos de transporte involucrados.
- Desarrollar un modelo matemático que represente de manera precisa la separación de gases ligeros en una columna de destilación.
- Implementar una simulación computacional que permita visualizar el comportamiento de las distintas variables estudiadas en la columna.

Introducción

La refinación del petróleo constituye el conjunto de operaciones unitarias destinadas a convertir el crudo en productos de mayor valor comercial. Dentro de dichas operaciones, la destilación multicomponente juega un rol clave al separar fracciones según sus volatibilidades, permitiendo la recuperación de gases ligeros como etano, propano y butano del destilado de petróleo crudo.

El objetivo de este proyecto es diseñar una columna de destilación a escala industrial focalizada en maximizar la recuperación de estos gases ligeros. Para ello se desarrollará un modelo matemático fundamentado en los principios de equilibrio de fases y transporte físico-químico, el cual se implementará en simulaciones computacionales para analizar el comportamiento del sistema y cuantificar su eficiencia separativa.

Este estudio refuerza la vinculación entre teoría y práctica al servir como herramienta formativa en ingeniería química. Además, integra conocimientos de operaciones unitarias y modelado de procesos, ofreciendo una visión aplicada de los desafíos presentes en la industria de refinación.

Justificación

La recuperación de gases ligeros en la refinación no sólo incrementa el rendimiento económico de la planta, sino que también responde a criterios de sostenibilidad al aprovechar al máximo recursos de alto valor energético. No obstante, las complejidades del equilibrio de fases y los múltiples fenómenos de transporte hacen que su análisis detallado sea un reto tanto en el ámbito académico como industrial.

Este proyecto provee una solución didáctica y técnica mediante el diseño de una columna industrial respaldada por un modelo matemático y su validación computacional. Con ello se facilita la comprensión de los mecanismos de separación y se permite evaluar de manera cuantitativa el desempeño del proceso antes de una implementación a escala real.

De esta forma, el trabajo aporta un enfoque multidisciplinario que fortalece competencias en modelado, simulación y análisis de operaciones unitarias, preparando al estudiante y al profesional para abordar escenarios reales en la industria de refinación de petróleo.

Marco Teórico

Introducción a los fenómenos de transporte

Los fenómenos de transporte en sistemas químicos involucran el movimiento de masa, energía y momento entre diferentes regiones del proceso. En una columna de destilación multicomponente estos fenómenos ocurren a escala macroscópica mediante flujos de fluido entre las etapas. Cada etapa de la columna se puede considerar como un volumen de control donde interactúan corrientes de alimentación, reflujo, vapor ascendente y líquido descendente, las cuales transportan masa, entalpía y momento. Estos flujos determinan cómo se distribuyen las concentraciones y las temperaturas a lo largo de la columna.

A escala microscópica, el transporte también se explica mediante mecanismos difusivos: la ley de Fick describe la difusión molecular de materia, la ley de Fourier el flujo de calor por conducción y la ley de Newton las fuerzas viscosas que producen transferencia de momento. Sin embargo, en el enfoque macroscópico propio de los balances globales de la columna, se simplifican estos detalles. En lugar de resolver gradientes locales, se considera que la transferencia neta de masa y energía ocurre por convección entre etapas contiguas. De este modo, las ecuaciones de balance se formulan en términos de flujos integrales: entradas menos salidas igual al cambio o acumulación en cada etapa o en la columna completa, sin necesidad de ecuaciones diferenciales complejas.

Fundamentos del transporte de masa

El transporte de masa en la columna de destilación se describe mediante los flujos convectivos entre etapas. Cada etapa recibe corrientes de vapor y de líquido con ciertas composiciones y cede otras con composiciones distintas, de modo que un componente predomina en la fase vapor (ascendente) y otro en la fase líquida (descendente). La separación multicomponente se logra porque cada componente tiende a migrar según su volatilidad, concentrándose preferentemente en la fase apropiada. En el balance global de materia para cada componente en una etapa, las entradas (flujos molares de vapor y líquido entrantes) menos las salidas (flujos salientes) equivalen al cambio de cantidad de

esa sustancia en la etapa (acumulación). En régimen estacionario este cambio es cero, por lo que las entradas y salidas se equilibran exactamente.

Este tratamiento macroscópico asume que cada etapa está en equilibrio termodinámico y uniformemente mezclada, de modo que cualquier transferencia de masa entre fase vapor y líquida se refleja en variaciones de los flujos molares. Aunque en detalle la ley de Fick explicaría la difusión molecular de cada componente, en los balances prácticos cada componente se transporta netamente por convección entre etapas. El modelo integra implícitamente el efecto de la difusión microscópica en los valores de los flujos de vapor y líquido, evitándose el uso de gradientes de concentración locales.

Fundamentos del transporte de energía

En la columna de destilación, el transporte de energía se manifiesta principalmente como transporte convectivo de entalpía asociado a las corrientes de vapor y líquido. Cada flujo transporta energía térmica: el vapor ascendente lleva entalpía debido a su temperatura (calor sensible) y al calor latente de la vaporización, mientras que el líquido descendente aporta entalpía de su calor sensible (y parte del calor latente al condensarse). En el balance energético de una etapa se contabilizan las entalpías de las corrientes entrantes y salientes; las entradas de entalpía menos las salidas equivalen al cambio de energía almacenada en la etapa. En este balance se incluyen, además, los aportes o extracciones de calor de los equipos auxiliares (reboiler y condensador) como entradas o salidas puntuales.

Este enfoque difiere del análisis de conducción de calor descrito por la ley de Fourier, que opera a nivel microscópico por gradientes de temperatura. En el modelo macroscópico de la columna se considera principalmente la entalpía transportada por los flujos convectivos, reservándose las leyes de conducción para comparaciones conceptuales. El calor suministrado por el reboiler y rechazado por el condensador se incorpora en los balances como entradas o salidas de energía. En la práctica, cuando el vapor condensa sobre el líquido descendente transfiere su calor latente al líquido, y cuando el líquido vaporiza en el reboiler absorbe entalpía, cerrando el ciclo energético de cada etapa. En resumen, la

distribución de energía en la columna se caracteriza por los flujos convectivos de entalpía de todas las corrientes, formulando los balances energéticos como entradas menos salidas igual a cambio, sin necesidad de resolver las ecuaciones de conducción térmica.

Fundamentos del transporte de momento

El transporte de momento en la columna de destilación está relacionado con las fuerzas ejercidas por el movimiento de los fluidos y sus interacciones en cada etapa. Cada corriente de vapor o de líquido que atraviesa una bandeja posee momento —producto de su masa por su velocidad— y experimenta fuerzas de fricción e inercia. Conceptualmente, el balance de momento se plantea considerando que la diferencia entre el momento entrante y el saliente de una etapa se compensa con las fuerzas externas (por ejemplo, el peso del líquido y la gravedad). Este balance se refleja en la caída de presión que ocurre a través de cada bandeja y a lo largo de la columna, resultado de la fricción del vapor con el líquido y con las superficies internas.

La velocidad y densidad de las corrientes influyen directamente en la magnitud del momento transportado. Un aumento en la velocidad del vapor incrementa el impulso que ejerce sobre el líquido, lo cual produce una mayor caída de presión. Este efecto explica los límites hidráulicos en la operación de la columna: un flujo de vapor excesivo genera un arrastre de líquido hacia arriba, provocando la *inundación* (flooding), donde la bandeja se llena de líquido y la presión ascendente se incrementa drásticamente. Por el contrario, un flujo de vapor insuficiente no puede sostener el líquido en las bandejas, provocando *weeping* (goteo) y disminuyendo la eficiencia de separación. En ambos casos las alteraciones en el transporte de momento repercuten en los balances de masa y energía, pues modifican los flujos efectivos que atraviesan las etapas.

Interacción entre los fenómenos de transporte en procesos industriales

En la operación de una columna de destilación multicomponente, los fenómenos de transporte de masa, energía y momento están íntimamente acoplados. Los flujos moleculares de materia transportan simultáneamente energía en forma de entalpía y

momento en forma de impulso de fluido. Por ejemplo, aumentar el flujo de reflujo líquido incrementa la cantidad de materia de componentes ligeros que asciende hacia etapas superiores, pero al mismo tiempo introduce mayor entalpía de líquido frío y modifica la caída de presión en la columna. De modo similar, elevar la potencia del reboiler aumenta el vapor ascendente (más transporte de masa) y la entalpía que circula, pero también incrementa la presión y la energía total en movimiento.

El diseño y la operación de la columna deben equilibrar estos tres balances. Los balances globales de masa y energía determinan la distribución de composición y temperatura en cada etapa, mientras que el balance de momento impone condiciones hidráulicas de operación. En la práctica, cualquier variación en los flujos afecta simultáneamente los tres balances: un cambio en la relación de reflujo o en la carga de alimentación alterará las corrientes de materia y energía y, a la vez, modificará la caída de presión. Fenómenos límite como la inundación y el goteo ejemplifican esta interacción: resultan de combinaciones extremas de flujos de vapor y líquido que rompen las condiciones óptimas de operación. En resumen, los tres fenómenos de transporte deben analizarse de manera conjunta en el diseño de la columna. Los balances se formulan a nivel global por etapa o para la columna entera según el principio entradas menos salidas igual a cambio, involucrando variables como flujos molares, entalpías y velocidades del fluido. Esta perspectiva integral permite predecir el comportamiento de la columna y asegurar condiciones óptimas de recuperación de gases ligeros en el destilado de petróleo crudo.

Desarrollo del Proyecto

Objeto de estudio

En el corazón del procesamiento contemporáneo de petróleo crudo yace la imperiosa necesidad de una recuperación eficiente de sus fracciones más volátiles y económicamente valiosas: los gases ligeros. Específicamente, la separación selectiva de etano, propano, i-butano y n-butano no solo representa una optimización crucial del rendimiento económico, sino que también se alinea con imperativos de sostenibilidad al maximizar el aprovechamiento de recursos energéticos de alta densidad. Sin embargo, la inherente complejidad del equilibrio de fases y la intrincada interacción de los fenómenos de transporte convierten esta tarea en un desafío técnico y académico considerable.

El presente proyecto acomete este desafío mediante el **diseño riguroso de una columna de destilación multicomponente a escala industrial**, concebida explícitamente para la recuperación optimizada de dichos gases ligeros a partir del destilado primario de petróleo. Este estudio se distingue por su profundo énfasis en la **comprensión y modelado de los fenómenos de transporte subyacentes** —transferencia de masa, energía y momento— que dictan la viabilidad y eficiencia del proceso separativo.

Así, el objeto de estudio trasciende el mero dimensionamiento del equipo; se adentra en el **análisis detallado del comportamiento fisicoquímico e hidrodinámico** dentro de la columna. Se busca desentrañar y cuantificar los mecanismos fundamentales que gobiernan la separación de estas mezclas multicomponentes complejas, absteniéndose deliberadamente de los procesos subsecuentes de tratamiento de las corrientes para concentrar el análisis en la unidad de destilación. De esta forma, se aspira a generar un conocimiento aplicable que no solo resuelva un problema industrial concreto, sino que también sirva como una herramienta formativa robusta en la ingeniería química.

Análisis del objeto de estudio

Fundamentos teóricos

La destilación multicomponente es una operación unitaria de separación utilizada para fraccionar mezclas homogéneas de líquidos mediante un intercambio sucesivo de calor y masa entre fases de vapor y líquido. Se aplica cuando las sustancias presentes tienen puntos de ebullición distintos y es necesario lograr fracciones de alta pureza (Wikipedia, 2024b).

Algunas mezclas pueden comportarse como *azeótropos*, es decir, presentan una composición líquida y vapor idéntica durante la vaporización, manteniendo temperatura y proporciones constantes hasta agotarse el volumen destinado al destilado (Galagvosky, 2002). En la práctica de destilación multicomponente, estos comportamientos complejos se identifican mediante curvas de punto de burbuja y de rocío, que sirven de base para estimar la distribución de componentes en cada etapa.

Una columna de destilación multicomponente se conecta a un *rehervidor* en la base y a un *condensador* en el tope, e internamente dispone de varias bandejas perforadas. Cada bandeja perforada proporciona zonas de contacto donde el vapor ascendente atraviesa los orificios y burbujea a través del líquido descendente, favoreciendo la transferencia simultánea de masa y energía fase-fase.

El ciclo operativo es el siguiente:

1. La alimentación (destilado primario) se introduce a una temperatura y presión determinadas y llega al rehervidor, donde parte del líquido se vaporiza.
2. El vapor generado asciende y atraviesa las bandejas perforadas una a una, cediendo su entalpía al líquido en cada etapa y enriqueciéndose progresivamente en componentes más volátiles.
3. En la cabeza de la columna, el vapor llega al condensador, que enfría y licúa parcialmente la corriente; una fracción de este producto condensado retorna como *reflujo* para mejorar la separación, mientras que el resto se extrae como destilado final.

La eficacia de este proceso se basa en las volatilidades relativas de los componentes de la mezcla: los compuestos más volátiles tienden a permanecer en fase vapor, mientras que los menos volátiles se concentran en la fase líquida. En cada bandeja existe un equilibrio dinámica vapor-líquido regido por la *ley de Raoult*, que establece que la presión parcial de cada componente en la fase vapor es proporcional a su fracción molar en la fase líquida (de Valencia, 2025). Este equilibrio asegura que, en régimen estacionario, la tasa de evaporación y condensación sea prácticamente constante en cada etapa.

El reflujo incrementa la pureza del producto superior al recircular parte del líquido condensado, promoviendo un enriquecimiento continuo de los componentes ligeros en la vaporación subsecuente. Asimismo, mantiene estable el perfil de temperatura y composición en la columna, ya que el líquido descendente arrastra los componentes menos volátiles y preserva el balance líquido-vapor en cada bandeja.

Sustancias de trabajo

La alimentación se compone de etano, propano, i-butano y n-butano. Sus puntos de ebullición a presión atmosférica son (para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico, 2024):

Componente	Punto de ebullición (°C)
Etano	-88,6
Propano	-42,1
i-Butano	-11,7
n-Butano	-0,5

Cuadro 1

Puntos de ebullición de los gases ligeros, objeto de recuperación.

Ficha tecnica de la columna de destilacion

Datos generales

- Nombre del equipo: Columna de destilación.
- Industria de aplicación: Petroquímica.
- Descripción general: Equipo diseñado para separar una mezcla de gases ligeros.
- Operación unitaria asociada: Destilación multicomponente.

Cuadro 2

Especificaciones técnicas

Parámetro	Unidad	Valor/Rango	Importancia
Temperatura de operación	K	220 – 280	Permite la vaporización de cada componente según su punto de ebullición.
Presión de operación	kPa	100 – 115	Mantiene el equilibrio de fases y condiciones seguras de operación.
Corrientes	kmol/h	0 – 400	Flujo de fases que cumplen el equilibrio líquido-vapor.
Dimensiones	m	Altura: 18 – 22; Diámetro: 1 – 2	Variables de diseño que aplican restricciones operativas.
Fuente de energía		Electricidad	Suministra el calor que el rehervidor necesita para su funcionamiento.
Material de construcción		Acero al carbono	Estructuralmente confiable en condiciones moderadas
Grosor de pared	mm	10	Asegura la resistencia a la presión y temperatura del equipo.

Cuadro 3

Componentes principales

Componente	Función dentro del Equipo	Material
Condensador	Condensa el vapor ascendente	Acero al carbono
Sistema de Reflujo	Retorna una fracción del condensado a la columna	Acero al carbono
Torre/Columna	Contenedor del sistema de separación	Acero al carbono
Platos perforados	Incrementan la superficie de contacto para las fases	Acero al carbono
Rehervidor	Hierve el líquido descendente	Acero al carbono

Relación con los Fenómenos de Transporte

- **Transporte de masa:** Se manifiesta en la convección de vapor y líquido en cada plato para equilibrar composiciones.
- **Transporte de energía:** Se manifiesta en la transferencia térmica convectiva entre corrientes de vapor y líquido.
- **Transporte de momento:** Se manifiesta en las caídas de presión y turbulencias que impulsan los flujos de las fases en la columna.

Control del Equipo

- **Variables monitoreadas:** Temperatura, presión, caudal de alimentación y reflujo.
- **Instrumentación:** Termopares, manómetros, caudalímetros y sensores de nivel.
- **Sistema de control:** PLC/SCADA con lazos PID para las variables operativas.

Aplicaciones en la Industria

- **Petroquímica:** Separación del petróleo crudo y de sus derivados.

- **Química:** Purificación de solventes y ácidos.
- **Cervecera:** Desalcoholización para cervezas sin alcohol.
- **Aceites esenciales:** Extracción de compuestos volátiles.

Aspectos Económicos y Ambientales

- **Costo estimado:** Alta inversión inicial en equipo y automatización, con costos operativos variables según la escala.
- **Consumo energético:** Elevado, pero optimizable mediante la recuperación de calor y mejora en la eficiencia del rehervidor y condensador.
- **Impacto ambiental:** Considerable debido al consumo de energía y posibles emisiones; sin embargo, se pueden mitigar mediante sistemas de tratamiento y reciclaje.
- **Estrategias de mitigación:** Recuperación de calor, sistemas de control de emisiones y tratamiento de residuos para minimizar el impacto ambiental.

Seguridad y Normativas

- **Riesgos asociados:** Altas temperaturas, presiones elevadas y manejo de fluidos inflamables y corrosivos.
- **Normativas aplicables:** ASME BPVC VIII-1, API 510, IEC 61511 & OSHA 1910.119 (PSM).
- **Medidas de seguridad:** Uso obligatorio de equipos de protección personal (EPP), dispositivos de alivio de presión, monitoreo continuo y protocolos de emergencia.

Mantenimiento y Vida Útil

- **Frecuencia:** Preventivo trimestral y predictivo continuo.
- **Procedimientos:** Limpieza, inspección de platos, calibración de sensores.
- **Esperanza de vida:** 20-30 años con mantenimiento riguroso.

Modelo matemático

El sistema a analizar es el siguiente:

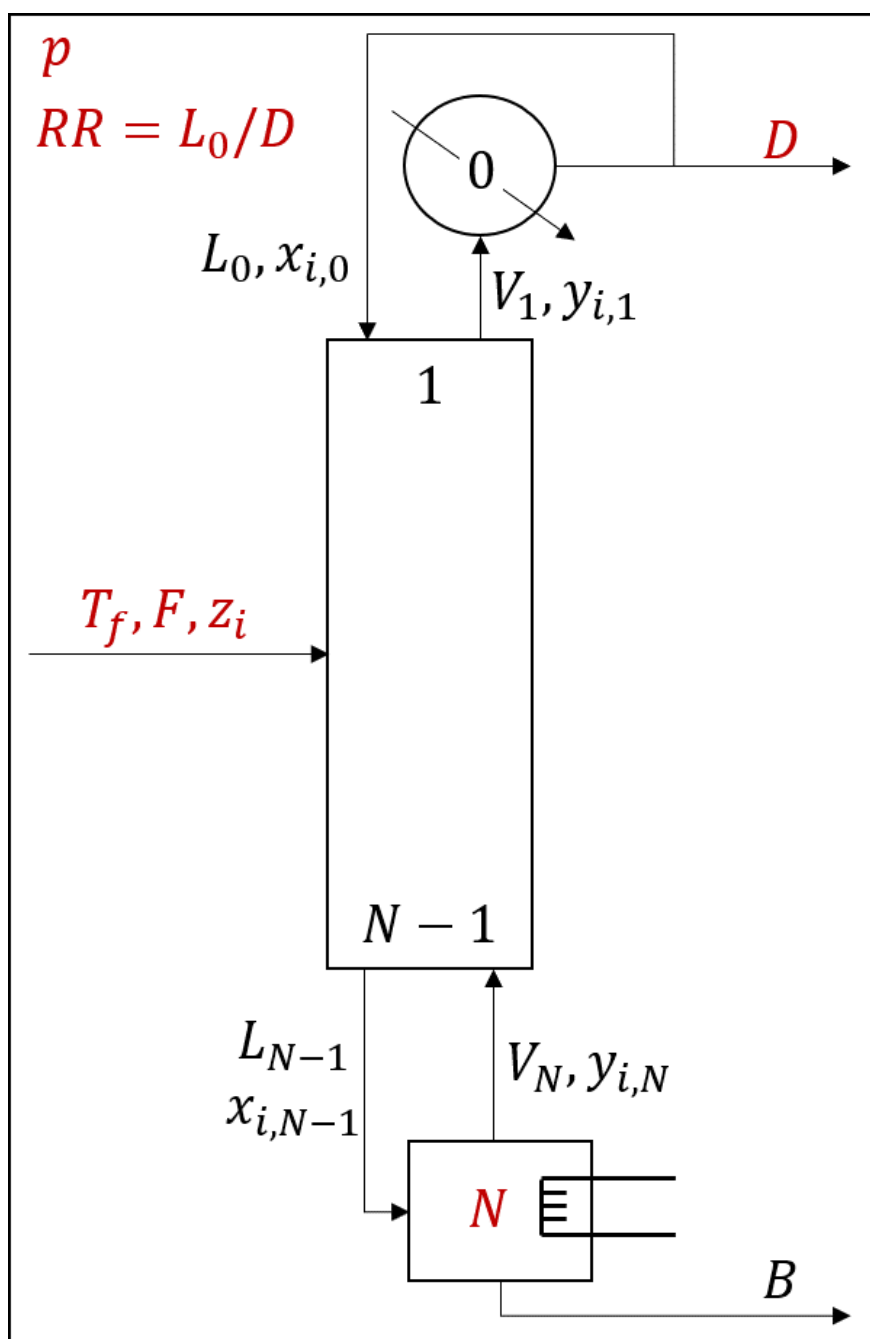


Figura 1

Diagrama de una columna de destilación multicomponente

Suposiciones fundamentales

Para elaborar un modelo matemático que pueda explicar y predecir el sistema es importante considerar las siguientes suposiciones:

1. Operación en estado estacionario:

Se asume que la columna opera de forma estacionaria, es decir, que las variables no cambian en el tiempo.

2. Equilibrio de fases en cada plato:

Se asume que el equilibrio de fases se alcanza en cada plato de la columna, por ende, las composiciones de las fases son iguales a las del equilibrio.

3. Mezcla ideal:

Se asume que la mezcla de componentes en la columna se comporta como una mezcla ideal, lo que implica que las propiedades termodinámicas de la mezcla se pueden calcular a partir de las propiedades de los componentes individuales.

4. Razón de reflujo constante:

Se asume que la razón de reflujo es constante a lo largo de la columna, lo que significa que la cantidad de líquido que se recicla al condensador es constante.

5. Columna adiabática:

Se asume que no hay transferencia de calor entre la columna y el entorno, lo que implica que la columna opera adiabáticamente.

Relaciones de equilibrio líquido-vapor

El equilibrio líquido-vapor se refiere a que en cada plato, la tasa de evaporación será igual a la tasa de condensación para todos los compuestos. De no haber un equilibrio líquido-vapor, todo el líquido se evaporaría o todo el vapor se condensaría, de esta manera no se cumpliría el objetivo de fraccionar los gases ligeros del petróleo (dejac001, 2025).

El comportamiento de equilibrio para cada componente en cada plato se explica utilizando la constante de equilibrio $K_{i,j}$:

$$y_{i,j} = K_{i,j}(T_j, P_j) x_{i,j},$$

donde:

- $y_{i,j}$ es la fracción molar en la fase vapor.
- $x_{i,j}$ es la fracción molar en la fase líquida.
- $K_{i,j}(T_j, P_j)$ es la constante de equilibrio.

Para determinar la constante $K_{i,j}$ se utiliza la ecuación empírica de DePriester:

$$\ln K_{i,j} = \frac{a_1}{T^2} + \frac{a_2}{T} + a_3 + b_1 \ln(P) + \frac{b_2}{P^2} + \frac{b_3}{P},$$

donde:

- $a_1, a_2, a_3, b_1, b_2, b_3$ son constantes.
- T_j es la temperatura del plato.
- P_j es la presión del plato.

La expresión de $x_{i,j}$ es la siguiente:

$$x_{i,j} = \frac{l_{i,j}}{L_j},$$

donde:

- $l_{i,j}$ es la corriente molar del componente i en el plato j .
- L_j es la corriente molar del plato j .

Temperatura de punto de burbuja

El “punto de burbuja” de una mezcla es la temperatura (a una presión dada) a la que la mezcla líquida comienza a generar la primera burbuja de vapor, es decir, en la que se inicia la vaporización.

Para hallar la temperatura de punto de burbuja se requiere conocer la presión de operación inicial de la columna y las fracciones molares líquidas en el destilado y el residuo. Después se calcula la constante de equilibrio para cada componente utilizando la ecuación de DePriester.

A continuación, se obtienen las fracciones molares de vapor utilizando:

$$y_{i,j} = K_{i,j}x_{i,j}$$

Finalmente, se verifica que la suma de las fracciones molares de vapor cumpla:

$$\sum_i y_{i,j} = 1$$

Este procedimiento es iterativo. Si la suma resulta mayor a 1, se debe disminuir la temperatura propuesta; si es menor, se aumenta. El proceso se repite hasta que se cumpla la igualdad, determinándose así la temperatura de punto de burbuja.

Número de platos reales y plato alimentado

Para determinar el número de platos reales y el punto alimentado en una columna de destilación, se emplea el método de Fenske-Underwood-Gilliland-Kirkbride. Este método introduce los conceptos de componente ligero (lk) y componente pesado (hk), definidos respectivamente como aquellos que se concentran en el destilado y en el residuo.

A continuación, se describen de manera sistemática los pasos a seguir:

1. Balance de masa en el destilado y el residuo:

Se parte de las siguientes relaciones:

$$f_{lk} = \frac{D_{lk}}{F_{lk}} \quad \longrightarrow \quad D_{lk} = f_{lk}F_{lk}z_{lk},$$

$$f_{hk} = \frac{D_{hk}}{F_{hk}} \quad \longrightarrow \quad D_{hk} = f_{hk}F_{hk}z_{hk},$$

donde D_{lk} y D_{hk} representan las corrientes molares de los componentes ligero y pesado en el destilado, respectivamente. Asimismo, F_{lk} y F_{hk} son las corrientes molares de estos mismos componentes en la alimentación, y z_i indica las fracciones molares de los componentes en la alimentación.

Tras realizar los balances para estos dos componentes, se puede asumir que los componentes menos volátiles que el componente ligero seleccionado se transfieren en su totalidad al destilado, mientras que los componentes más volátiles que el componente pesado elegido se concentran íntegramente en el residuo. Con estos balances se determinan las fracciones molares líquidas para cada compuesto en ambas corrientes.

2. Cálculo del equilibrio de fases:

a) Determinación de la temperatura de punto de burbuja:

Tal cual como se explicó anteriormente, se calcula la temperatura de punto de burbuja para cada componente en el destilado y el residuo. Esto se realiza utilizando la presión de operación inicial de la columna y las fracciones molares líquidas. De esta forma se obtienen los valores de las constantes de equilibrio.

b) Determinación de las volatilidades relativas:

Para cada componente, la volatilidad relativa se define como:

$$\alpha_{i,hk} = \frac{K_i}{K_{hk}}$$

Deben calcularse tanto al destilado como al residuo.

c) Determinación de la volatilidad relativa media:

Es necesario calcular la volatilidad relativa media que se expresa como:

$$\bar{\alpha}_{i,hk} = \sqrt{\alpha_{i,hk}^D \alpha_{i,hk}^B}$$

3. Determinación de platos mínimos:

Utilizando la ecuación de Fenske se calcula el número mínimo de platos:

$$N_{min} = \frac{\ln \left(\frac{x_k^D}{x_{hk}^D} \frac{x_{hk}^B}{x_k^B} \right)}{\ln(\alpha_{lk,hk})}$$

4. Determinación del reflujo mínimo:

Para hallar el reflujo mínimo se emplean las ecuaciones de Underwood. Inicialmente se resuelve:

$$\sum_i \frac{\alpha_i z_i}{\alpha_i - \theta} = 1 - q,$$

donde θ es el factor de separación, el cual satisface la condición $\alpha_{hk} < \theta < \alpha_{lk}$, y q representa el porcentaje de saturación de la corriente de alimentación.

Una vez hallado θ , se sustituye en:

$$R_{min} = \sum_i \frac{\alpha_i x_i^D}{\alpha_i - \theta} - 1$$

5. Número de platos reales y plato alimentado:

Para hallar el número de platos de reales N se utiliza la correlación de Gilliland:

$$\frac{N - N_{min}}{N + 1} = 0.75 \left(1 - \left(\frac{R - R_{min}}{R + 1} \right)^{0.5688} \right)$$

En cuanto al plato alimentado N_r , se aplica la correlación de Kirkbride:

$$\frac{N_r}{N_s} = \left(\frac{z_{hk} B}{z_{lk} D} \left(\frac{x_{lk}^B}{x_{hk}^D} \right)^2 \right)^{0.206}$$

Dado que $N_r + N_s = N$, se calcula:

$$N_R = \frac{\frac{N_r}{N_s}}{1 + \frac{N_r}{N_s}} N$$

Los procedimientos descritos permiten determinar analíticamente tanto el número de platos reales como el punto de alimentación de la columna, cálculos esenciales para el diseño y la operación óptima que garantizan la eficiencia en la separación de componentes; en ambos casos (temperatura de punto de burbuja y determinación de platos de equilibrio y del plato de alimentación) se empleó como referencia la información del video de Misael (2021b).

Relación de reflujo óptima

Se le llama reflujo a la porción de líquido que se devuelve desde el condensador a la parte superior de la columna para mejorar la separación de los componentes.

El reflujo debe ser líquido, la relación molar entre el reflujo y el destilado separado es la relación de reflujo, algunas veces llamada relación de reflujo externo (Treybal, 1980).

$$R = \frac{L_0}{D},$$

donde:

- R es la relación de reflujo.
- L_0 es el flujo molar del reflujo que retorna a la columna.
- D es el flujo molar del destilado separado.

1. Relación mínima de reflujo:

La relación mínima de reflujo R_{min} es aquella para la cual se requeriría un número infinito de platos teóricos para alcanzar la separación deseada. Es decir, mientras más bajo sea el reflujo, mayor será el número de platos necesarios.

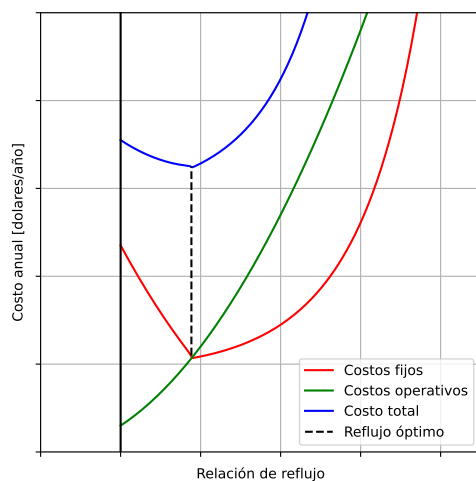
2. Relación de reflujo total:

El reflujo total se presenta cuando todo el destilado proveniente del condensador retorna completamente a la columna de destilación. En este caso, el flujo molar del destilado D tiende a cero, cumpliéndose la siguiente relación:

$$R = \lim_{D \rightarrow 0} \frac{L_0}{D} = \infty$$

3. Relación óptima de reflujo:

Tanto el reflujo mínimo como el total permiten alcanzar la separación deseada, pero cada uno implica diferentes requerimientos. La relación de reflujo óptima busca un equilibrio entre ambos extremos.

Figura 2*Curvas de costos*

La relación de reflujo que debe emplearse en un nuevo diseño debe ser la óptima, es decir, aquella para la cual el costo total del sistema sea mínimo (Treybal, 1980).

- **Costos fijos:** No dependen directamente del reflujo y tienden a disminuir a medida que aumenta R .
- **Costos de operación:** Dependen del consumo energético y aumentan con R , ya que un mayor reflujo requiere más energía en el condensador y el rehervidor.
- **Costo total:** Es la suma de los costos fijos y operativos. Esta curva tiene un punto mínimo.

Condiciones de frontera

1. Extremo superior (Condensador total):

Se asume que todo el vapor que asciende a la parte superior es condensado, de modo que la corriente de vapor saliente es nula. El líquido condensado se divide en dos corrientes: una que se recicla a la columna como reflujo, determinada por la razón de reflujo, y otra que se extrae como destilado. En los balances de masa y energía de esta sección se incorporan estos dos flujos, garantizando la continuidad del reflujo y la extracción del producto.

2. Extremo inferior (rehervidor parcial):

En la base de la columna se implementa un rehervidor parcial, donde solo se vaporiza una fracción del líquido. Esto establece dos corrientes: una corriente de vapor que asciende en la columna y una corriente líquida que se retira como producto de fondo. El balance de energía en esta zona considera la cantidad de calor suministrado, el cual es suficiente para vaporizar parte del líquido y mantener el equilibrio de fases en la etapa inferior.

3. Condición de alimentación:

La alimentación se introduce en una etapa intermedia con un flujo y composición determinados, y se asume que se encuentra en estado de saturación (líquido a punto de burbuja) bajo las condiciones operativas de presión. Esta condición fija el punto de inyección y la temperatura de alimentación, que se ajusta mediante el cálculo del punto de burbuja para la composición dada.

Estas condiciones de frontera aseguran que los balances de masa y energía se formulen de manera coherente en los extremos de la columna y en el punto de alimentación, permitiendo la determinación de las variables operativas en estado estacionario.

Balance de momento

En una columna de destilación multicomponente con platos perforados (sieve trays), el balance de momento es esencial para garantizar condiciones operativas seguras y evitar dos fenómenos críticos:

1. **Inundación (Flooding):** Fenómeno desencadenado por velocidades de vapor (u_j) excesivas, donde las fuerzas de arrastre superan la gravedad, transportando líquido a etapas superiores. Este flujo inverso degrada la eficiencia de separación al reducir el tiempo de contacto líquido-vapor, induce perfiles de presión erráticos que distorsionan los cálculos de equilibrio termodinámico ($K_i = f(T_j, P_j)$), y en casos extremos, compromete la integridad mecánica de la columna por sobrecargas estructurales.
2. **Goteo (Weeping):** Condición operativa donde velocidades de vapor (u_j) insuficientes permiten el drenaje no controlado de líquido a través de los orificios del plato. Este flujo descendente evita la formación de la espuma de burbujas necesaria para la transferencia de masa, genera heterogeneidades en la distribución de líquido que desestabilizan los balances de energía, y puede arrastrar componentes pesados al destilado, contaminando productos valiosos.

Es clave considerar las caídas de presión por plato (ΔP_j), ya que definen el perfil real de presiones en la columna y evitan errores en el cálculo de las constantes K_i (que dependen de T y P). Además, ΔP_j está ligada a la velocidad del vapor: valores altos pueden causar inundación y valores bajos favorecen el goteo. Modelar ΔP_j y mantener la velocidad de vapor u_j dentro de límites seguros ($u_{\min,j} < u_j < u_{\max,j}$) asegura la estabilidad hidrodinámica necesaria para una operación industrial fiable.

1. Variables de diseño geométrico:

Para cada plato se definen las siguientes cantidades, que se emplean en los cálculos de caídas de presión y velocidades:

d : diámetro de cada plato, $d_h = a_1 d$: diámetro de cada hueco.

$A = \pi d^2/4$: área de cada plato, $A_{ac} = a_2 A$: área activa de cada plato.

$A_{hs} = a_3 A_{ac}$: área de los huecos, $N_{hs} = 4 A_{hs}/\pi d_h^2$: número de huecos.

donde a_i son fracciones de diseño.

2. Cálculo de densidades por etapa:

Las densidades de fase líquida $\rho_{L,j}$ y de fase vapor $\rho_{V,j}$ se obtienen a partir de las fracciones molares locales y las propiedades de los componentes presentes. Este cálculo es esencial para determinar con precisión las velocidades y las caídas de presión posteriores.

a) Densidad del líquido:

Se calcula mediante una media armónica ponderada con base en las densidades puras estimadas y las fracciones molares:

$$\rho_{L,j} = \frac{\sum_i x_{i,j} M_i}{\sum_i \frac{x_{i,j} M_i}{\rho_{L,i}^\circ}}$$

b) Densidad del vapor:

Asumiendo comportamiento ideal, se utiliza la ley de los gases ideales:

$$\rho_{V,j} = \frac{P_j}{R T_j} \sum_i y_{i,j} M_i$$

donde:

- M_i : masa molar del componente i .
- $\rho_{L,i}^\circ$: densidad estandar del componente puro en fase líquida.
- R : constante de los gases ideales (8314 J/kmol · K).

3. Cálculo de velocidades características:

La velocidad del vapor en cada etapa j se calcula como:

$$u_j = \frac{\dot{V}_j}{\rho_{V,j} A_{ac}} \quad \text{con} \quad \dot{V}_j = \frac{V_j}{3600} \sum_i y_{i,j} M_i.$$

Las velocidades mínima y máxima se emplean como límites de diseño:

a) **Velocidad mínima** $u_{\min,j}$:

Evita el goteo del líquido a través de los huecos.

$$u_{\min,j} = k_{\min} \sqrt{\frac{\sigma_j}{\rho_{L,j} d_h}}$$

b) **Velocidad máxima** $u_{\max,j}$:

Evita la inundación del plato.

$$u_{\max,j} = k_{\max} \sqrt{\frac{\rho_{L,j} - \rho_{V,j}}{\rho_{V,j}}}$$

donde k_{\min}, k_{\max} son constantes empíricas.

4. **Cálculo de presión por plato:**

La presión en cada etapa j se determina acumulando las pérdidas desde el condensador.

Estas pérdidas de presión ΔP_j se dividen en tres componentes principales:

a) **Presión acumulada:**

$$P_j = P_{\text{condensador}} + \sum_{k=1}^j \Delta P_k$$

b) **Caída por fricción del vapor:**

Basada en una correlación para platos perforados:

$$\Delta P_{\text{vap},j} = c_p u_j^2 \rho_{V,j} \quad \text{con} \quad c_p = \frac{1}{334.76 c_v^2}$$

c) **Carga hidrostática del líquido:**

Asociada a la altura del líquido sobre el plato:

$$\Delta P_{\text{liq},j} = \rho_{L,j} g h_L \quad \text{con} \quad h_L = h_w + h_{ow}$$

donde h_w la altura del vertedero y h_{ow} la altura del líquido sobre el vertedero.

d) **Efecto capilar:**

Asociada a la tensión superficial en los huecos del plato:

$$\Delta P_{\text{cap},j} = \frac{\sigma_j}{d_h} \left(\frac{\rho_{L,j}}{\rho_{V,j}} \right)^{0.25}$$

e) **Suma total de caídas:**

$$\Delta P_j = \Delta P_{\text{vap},j} + \Delta P_{\text{liq},j} + \Delta P_{\text{cap},j}$$

5. Cálculo de la tensión superficial:

La tensión superficial de una mezcla líquida puede estimarse mediante la correlación de Brock-Bird, que se basa en propiedades críticas y de ebullición estándar. Para una mezcla con fracciones molares x_i a temperatura T , la expresión completa es:

$$\sigma = 10^{-3} \left[0.1198 \left(1 + \frac{T_{r,eb}}{1 - T_{r,eb}} \ln\left(\frac{P_c}{1.013}\right) \right) - 0.278 \right] \cdot P_c^{2/3} \cdot T_c^{1/3} \cdot (1 - T_r)^{11/9}$$

donde:

$$T_c = \sum_i x_i T_{c,i} \quad P_c = \sum_i x_i P_{c,i} \quad T_{eb} = \sum_i x_i T_{eb,i}.$$

y las temperaturas reducidas son:

$$T_r = \frac{T}{T_c}, \quad T_{r,eb} = \frac{T_{eb}}{T_c}.$$

6. Cálculo del espaciado entre platos:

La separación óptima entre platos, S , se obtiene imponiendo que la relación característica de operación no supere un valor empírico $k_{\text{máx}}$. Esto conduce a la siguiente ecuación en S :

$$0.193 \left(\frac{d_h^2 \bar{\sigma}}{\bar{\rho}_L} \right)^{1/8} \left(\frac{\bar{\rho}_L}{\bar{\rho}_V} \right)^{1/10} \left(\frac{S}{h_L} \right)^{1/2} = k_{\text{máx}},$$

donde $(\bar{\sigma}, \bar{\rho}_L, \bar{\rho}_V)$ son los valores promedio de tensión superficial y densidades de líquido y vapor.

Preparación de los balances de masa y energía

Para el desarrollo de los balances de masa y energía que se presentan a continuación, considere el j -ésimo plato de la columna.

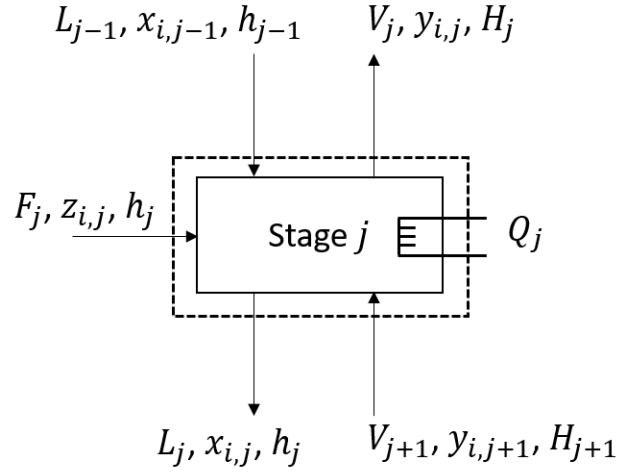


Figura 3

Diagrama de un plato específico de la columna utilizado para desarrollar los balances de masa y energía.

Balance de masa

Dada la naturaleza del problema, se deben formular y resolver numerosos balances de masa en cada etapa de la columna, lo que naturalmente conduce a la generación de un sistema de ecuaciones. Formalmente, para el i -ésimo componente y para el j -ésimo plato se establece un balance de masa de la forma:

$$V_j y_{i,j} + L_j x_{i,j} - V_{j+1} y_{i,j+1} - L_{j-1} x_{i,j-1} = F_j z_{i,j},$$

donde V y L representan, respectivamente, los flujos molares de vapor y de líquido mientras que F es el flujo de alimentación.

La tasa de flujo líquido L_k se calcula mediante

$$L_k = V_{k+1} - D + \sum_{m=0}^k F_m$$

donde $\sum_{m=0}^k F_m$ representa la alimentación acumulada hasta la etapa k . De este modo, el sistema de ecuaciones resultante depende únicamente de V_j y V_{j+1} .

Al recopilar los balances de masa de todas los platos y componentes, se obtiene un sistema de ecuaciones lineales que puede expresarse en forma matricial como:

$$A x = b,$$

donde:

- x es el vector de incógnitas que representa los caudales molares líquidos del componente en cuestión, es decir, los valores $l_{i,j}$ para cada etapa j .
- b es el vector de términos constantes que recoge las contribuciones de la alimentación en cada etapa, $F_j z_{i,j}$, así como las condiciones de frontera impuestas en el condensador total y el rehervidor parcial.
- A es la matriz de coeficientes, estructurada de forma tridiagonal, que vincula los caudales de vapor y líquido de etapas adyacentes en el balance de masa.

Debido a la naturaleza de los balances en la columna, donde cada etapa solo interactúa con las adyacentes (por ejemplo, la etapa j interactúa con $j - 1$ y $j + 1$), la matriz A presenta una estructura tridiagonal:

$$A = \begin{bmatrix} b_0 & c_0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_0 & b_1 & c_1 & \cdots & 0 \\ 0 & a_1 & b_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & c_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & a_{n-1} & b_n \end{bmatrix}.$$

Esta estructura es especialmente ventajosa, ya que permite resolver el sistema de manera muy eficiente utilizando algoritmos específicos para matrices tridiagonales, como el método de Thomas. La formulación en esta forma asegura una solución computacionalmente óptima para el conjunto de balances de masa, facilitando el modelado global de la columna de destilación.

Balance de energía

Las temperaturas en cada plato son necesarias para calcular las entalpías de líquidos y vapores. Formalmente, para el i -ésimo componente y para el j -ésimo plato se establece un balance de energía de la forma:

$$V_j H_j + L_j h_j - V_{j+1} H_{j+1} - L_{j-1} h_{j-1} = F_j h_{F,j} + Q_j$$

El término Q_j representa la energía retirada o suministrada a las corrientes, para $j = 0$ y $j = N$ se estudian los siguientes casos:

1. Energía retirada en el condensador:

El condensador es el equipo donde el vapor ascendente proveniente del rehervidor se enfría y condensa, transfiriendo calor al ambiente o a un sistema de enfriamiento (dejac001, 2025).

La ecuación de balance de energía en el condensador se expresa como:

$$Q_0 = D (1 + R) (h_0 - H_1)$$

donde:

- D es el flujo molar del destilado.
- R es la relación de reflujo.
- h_0 es la entalpía del líquido en el primer plato.
- H_1 es la entalpía del vapor en el segundo plato.

2. Energía suministrada en el rehervidor:

El rehervidor suministra la energía necesaria para vaporizar parte del líquido en el fondo de la columna. Esta energía se aporta generalmente desde una fuente externa, como una caldera. El balance energético considera tanto el calor suministrado como el necesario para mantener la operación del sistema (dejac001, 2025).

La ecuación de energía en el rehervidor se define como:

$$Q_N = D h_0 + B h_N - F_{al} h_{al} - Q_0$$

donde:

- D es el flujo molar del destilado.
- B es el flujo molar del fondo.
- h_N es la entalpía del vapor en el último plato.
- F_{al} es el flujo molar de la alimentación.
- h_{al} es la entalpía de la alimentación en el punto de entrada.

Las entalpías de los vapores y líquidos se calculan a partir de las temperaturas de cada plato:

1. Entalpía de vapor:

Se calcula como:

$$H_j = \sum_i y_{ij} H_i^*(T_j)$$

donde $H_i^*(T_j)$ es la entalpía del componente i puro.

Para calcular la entalpía del componente puro, usamos la siguiente ecuación:

$$H_i^*(T_j) = \Delta H^\circ + \int_{T_{\text{ref},i}}^{T_j} C_{p_{V,i}}(T) dT$$

donde:

- $C_{p_{V,i}}$ es la capacidad calorífica del vapor.
- ΔH° es la variación de la entalpía a condiciones estándar.

$C_{p_{V,i}}$ se calcula utilizando el modelo propuesto en el libro de Termodinámica de Çengel y Boles:

$$C_{p_{V,i}} = A + BT + CT^2 + DT^3$$

Las constantes A , B , C y D son específicas para cada componente y se obtienen de tablas de propiedades termodinámicas.

2. Entalpía del líquido:

Se calcula como:

$$h_j = \sum_i x_{ij} h_i^*(T_j)$$

donde $h_i^*(T_j)$ es la entalpía del componente i puro.

Para calcular la entalpía para cada componente puro, se usa la siguiente ecuación:

$$h_i(T) = \int_{T_{\text{ref},i}}^{T_j} C_{pL,i}(T) dT$$

donde $C_{pL,i}$ es la capacidad calorífica del líquido.

$C_{pL,i}$ se calcula utilizando el siguiente modelo:

$$C_{pV,i} = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$$

Las constantes A , B , C y D son específicas para cada componente y se obtuvieron a partir de datos del $C_{pL,i}$ a presión estandar y distintas temperaturas, fue necesario hacer regresión para obtener los coeficientes de la ecuación.

3. Entalpía de mezcla de alimentación:

La entalpía de la mezcla de alimentación se obtiene de la siguiente manera:

$$h = \sum_i z_i h_i^*(T_{\text{al}})$$

donde:

- z_i es la fracción molar del componente i en la mezcla de alimentación.
- $h_i^*(T_{\text{al}})$ es la entalpía del componente puro i a la temperatura T_{al} , que es la temperatura de la alimentación.

La entalpía del componente puro se obtiene con la misma integral de entalpía para componente puro en los líquidos.

Método de resolución del modelo matemático

Enfoque numérico para la resolución del modelo

El análisis de una columna de destilación fraccionada implica resolver un conjunto altamente acoplado de ecuaciones no lineales que describen el comportamiento del sistema. Estas ecuaciones surgen de los balances de materia y energía en cada etapa de la columna, junto con las relaciones de equilibrio entre las fases líquida y vapor. Debido a la naturaleza interdependiente de estas ecuaciones y a la imposibilidad de desacoplarlas de forma general, no es posible encontrar una solución cerrada o analítica para el problema completo. Este tipo de problema pertenece a la clase de sistemas algebraicos no lineales, donde el número de incógnitas y ecuaciones crece rápidamente con el número de etapas (o platos) y de componentes presentes en la mezcla. Por tanto, su resolución requiere técnicas numéricas que permitan encontrar una solución aproximada mediante procedimientos iterativos.

1. Estructura del sistema de ecuaciones:

El sistema de ecuaciones incluye:

a) **Balances de materia por componentes:**

Aseguran la conservación de masa en cada etapa.

b) **Relaciones de equilibrio líquido-vapor:**

Determinan la distribución de los componentes entre las fases en función de la temperatura y presión.

c) **Balances de energía:**

Relacionan las entradas y salidas energéticas en cada plato, incluyendo entalpías de vapor y líquido.

d) **Restricciones de suma:**

Garantizan que las fracciones molares de cada componente en la fase líquida y vapor sumen uno.

Estas ecuaciones se combinan en un sistema altamente no lineal y fuertemente acoplado,

lo que significa que la solución en una etapa depende directamente de la solución en otras etapas.

2. Naturaleza iterativa de la resolución:

Dado que una solución exacta es inalcanzable para sistemas de esta complejidad, se recurre a métodos iterativos, que consisten en realizar aproximaciones sucesivas a las variables de estado, actualizándolas paso a paso hasta alcanzar una solución consistente.

Cada iteración se basa en los valores actuales de las variables y en la aplicación repetida de los principios físicos que gobiernan el proceso. Así, por ejemplo, se recalculan las temperaturas que satisfacen las condiciones de equilibrio, se ajustan los flujos para que cumplan los balances de masa, y se recalculan entalpías para verificar la conservación de energía. Esta dinámica puede entenderse como una simulación progresiva del sistema hasta que los cambios entre iteraciones son suficientemente pequeños.

3. Sensibilidad a condiciones iniciales:

Otro aspecto fundamental de los métodos iterativos es su dependencia de las condiciones iniciales. Dado que los métodos numéricos buscan soluciones por aproximación, el punto de partida afecta directamente a la rapidez de convergencia y a la estabilidad del proceso. Una estimación inicial bien fundamentada puede conducir a una solución rápida y precisa, mientras que una mala elección puede provocar oscilaciones, divergencia o convergencia hacia soluciones físicamente no válidas.

Por ello, es habitual emplear información previa, heurística o incluso soluciones analíticas aproximadas para establecer valores iniciales realistas.

4. Ventajas del enfoque numérico:

La principal ventaja de este enfoque es su versatilidad: permite resolver sistemas complejos con múltiples componentes, configuraciones de columna arbitrarias y condiciones de operación realistas sin necesidad de hacer simplificaciones drásticas. Esto

lo convierte en una herramienta poderosa para la simulación y el diseño de procesos industriales.

No obstante, esta flexibilidad viene acompañada de un coste computacional y una sensibilidad que exigen criterios rigurosos de validación y análisis. En particular, es necesario verificar que la solución obtenida no solo cumple los criterios numéricos de convergencia, sino que también es coherente desde el punto de vista real.

Métodos numéricos empleados

El modelado matemático de la columna de destilación fraccionada se basa en la aplicación rigurosa de diversas técnicas numéricas para resolver de forma simultánea los balances de materia y energía, así como para establecer el equilibrio entre fases en cada etapa del proceso. En este enfoque se consideran, entre otros, los siguientes métodos:

1. Determinación de la temperatura de burbuja mediante búsqueda de raíz:

Para encontrar la temperatura T que cumple la condición de equilibrio vapor-líquido en la mezcla, se aplica un método numérico de búsqueda de raíz a la ecuación:

$$\sum_i (K_i(T, P) x_i) - 1 = 0.$$

De esta forma se ajusta T hasta que la suma de las fracciones molares en fase vapor sea exactamente igual a la unidad.

2. Solución de sistemas lineales tridiagonales de balances de masa:

Los balances de materia en cada etapa generan un sistema de ecuaciones lineales con coeficientes en forma tridiagonal:

$$a_i l_{i-1} + b_i l_i + c_i l_{i+1} = d_i.$$

Se emplea un algoritmo optimizado que aprovecha esta estructura de banda estrecha para calcular rápidamente los flujos líquidos en todos los platos.

3. Actualización iterativa de variables por punto fijo:

Las variables acopladas —temperaturas, composiciones y caudales— se actualizan mediante un proceso de punto fijo:

$$x^{(k+1)} = g\left(x^{(k)}\right),$$

donde la función g recoge las relaciones de equilibrio y balance del proceso. Se repite hasta que las diferencias entre dos iteraciones sucesivas queden por debajo de las tolerancias establecidas.

Criterios de convergencia

La convergencia se verifica con dos indicadores:

$$|X_{\text{nuevo}} - X_{\text{viejo}}| < \epsilon_{\text{abs}}$$

Este criterio es absoluto y se utiliza para las temperaturas y presiones.

$$\left| \frac{X_{\text{nuevo}} - X_{\text{viejo}}}{X_{\text{nuevo}}} \right| < \epsilon_{\text{rel}}$$

Este criterio es relativo y se utiliza para las para densidades, velocidades y caudales

Las tolerancias empleadas son:

$$\epsilon_{\text{abs},T} = 10^{-2}, \quad \epsilon_{\text{abs},P} = 10^1, \quad \epsilon_{\text{rel},\rho} = 10^{-3}, \quad \epsilon_{\text{rel},u} = 10^{-3}, \quad \epsilon_{\text{rel},L} = 10^{-4}, \quad \epsilon_{\text{rel},V} = 10^{-4}.$$

Algoritmo de resolución

El procedimiento de resolución del sistema se organiza en una secuencia lógica que parte de una condición base simple y evoluciona gradualmente hacia una solución consistente y estable. El proceso se estructura en dos grandes etapas: una inicial de arranque y otra iterativa de ajuste progresivo.

1. Condiciones iniciales de temperatura y presión:

En la primera iteración, se asigna a todos los platos de la columna una temperatura igual a la temperatura de burbuja del alimento. A su vez, se considera que la presión en toda la columna es igual a la presión del condensador. Esto permite simplificar el cálculo

inicial y establecer un punto de partida uniforme desde el cual se ajustarán todas las demás variables.

2. Inicialización de flujos:

Se definen valores constantes para los caudales de líquido descendente y vapor ascendente en cada plato. Estos valores se calculan a partir del caudal de destilado, del caudal de residuo y de la relación de reflujo. Se impone que el flujo de vapor sea el mismo en todos los platos, y también se considera constante el flujo de líquido en cada sección de la columna (rectificadora y agotadora). Esta suposición simplifica los primeros balances de materia y permite avanzar hacia una solución sin necesidad de conocer aún las condiciones detalladas de cada plato.

3. Ajuste iterativo de composiciones, temperaturas y flujos (ciclo interno):

Con las condiciones iniciales ya impuestas, comienza un ciclo de cálculos repetitivos en cada iteración. En este ciclo:

- Se ajustan las composiciones líquidas de cada plato resolviendo balances de materia, considerando la distribución entre fases para cada componente.
- A partir de esas composiciones, se corrige la temperatura de cada plato de forma progresiva, llevándola hacia su correspondiente temperatura de burbuja. Esta corrección se repite hasta que todas las temperaturas cambian menos que un valor tolerable.
- Luego, se realiza un balance de energía que permite actualizar los caudales de vapor y líquido, considerando las condiciones actuales de temperatura y composición.

Este ciclo garantiza coherencia entre la distribución de especies, las temperaturas y los flujos internos antes de seguir con otras variables dependientes.

4. Inicio del bucle de convergencia global:

Una vez establecida una base razonable para las variables principales, se inicia un bucle externo que repetirá varios bloques de cálculo hasta alcanzar la estabilidad completa del sistema:

a) **Cálculo de densidades:**

Se calculan las densidades líquidas y de vapor en cada plato en función de sus temperaturas y composiciones. Este paso se repite hasta que los valores obtenidos cambian menos que un umbral mínimo.

b) **Cálculo de velocidades:**

Con las densidades ya determinadas, se evalúan las velocidades reales del vapor que asciende por la columna. Estas velocidades dependen directamente de las densidades y de los flujos de vapor previamente calculados.

c) **Cálculo de presiones:**

Utilizando las velocidades obtenidas, se calcula la caída de presión entre platos, que depende de la fricción del vapor, del líquido y de efectos capilares. A partir de la presión en el condensador, se actualizan las presiones de cada plato hacia el fondo. Este orden es esencial, ya que las presiones no pueden ajustarse antes de conocer las velocidades, y las velocidades no pueden calcularse sin conocer antes las densidades.

d) **Reajuste de composiciones, temperaturas y flujos:**

Con las nuevas presiones en cada plato, se repite el ciclo interno del paso 3, ya que ahora las condiciones han cambiado y es necesario recalcular las composiciones, las temperaturas y los flujos energéticos.

e) **Verificación de estabilidad:**

Se evalúa si los cambios en flujos y velocidades son suficientemente pequeños y si las velocidades reales se mantienen dentro de los márgenes seguros. Si se cumplen estas condiciones, se da por finalizado el proceso.

5. Condiciones de parada por no convergencia:

Si después de un número máximo de iteraciones el sistema no ha logrado estabilizar todas sus variables, se detiene el cálculo. El motivo del fallo puede ser que las velocidades en algún plato estén fuera de los límites admisibles, o simplemente que los flujos no hayan logrado estabilizarse dentro del número permitido de ciclos.

6. Cálculos finales:

Una vez alcanzada la convergencia, se calcula la fracción líquida y de vapor de cada plato. También se determina el espaciado adecuado entre platos, considerando las condiciones estabilizadas de operación y las velocidades alcanzadas.

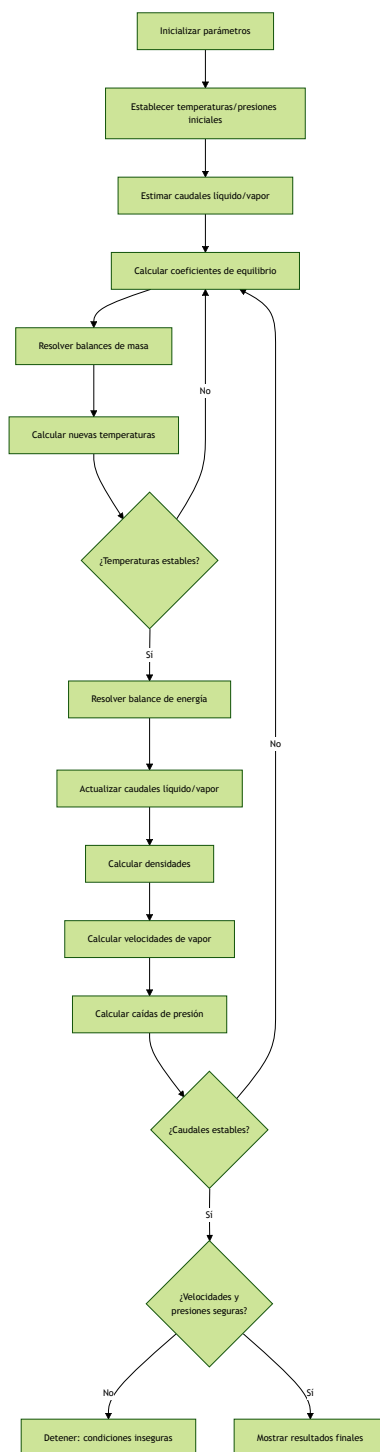


Figura 4

Algoritmo para la resolución del modelo matemático de la columna de destilación fraccionada.

Resultados de la resolución del modelo matemático

Para el diseño de la columna de destilación se partió de una alimentación líquida saturada de 200 kmol/h con fracciones molares, en fase líquida, de etano (4.1 %), propano (62 %), i-butano (16.6 %) y n-butano (17.3 %). Las condiciones de operación consideraron una presión uniforme de 101 325 Pa tanto en el condensador como en el rehervidor, y una temperatura inicial de cálculo del punto de burbuja de 250 K. La relación de reflujo real se fijó en 1.5 veces el mínimo, $R/R_{\min} = 1.5$, aplicando una eficiencia de platos $\eta = 0.5$ según la expresión:

$$R_{\text{real}} = \frac{R}{\eta}.$$

Mediante la aplicación de las correlaciones de Fenske, Underwood, Gilliland y Kirkbride, se determinaron inicialmente 21 platos teóricos, con el punto de alimentación en la posición 12. El balance de caudales arrojó un flujo de destilado $D = 166$ kmol/h y un flujo de fondos $B = 34$ kmol/h. Asimismo, la relación de reflujo mínimo resultó $R_{\min} = 0.436$, la relación teórica $R = 0.653$ y la relación real $R_{\text{real}} = 1.307$.

Al incorporar los efectos del condensador y del rehervidor, el diseño final se ajustó a 23 platos, desplazando la alimentación al plato número 13. En cuanto a la configuración hidráulica y geométrica de los platos, cada uno presenta un diámetro de 1.5 m y un espaciamiento vertical de 0.85 m. El área activa corresponde al 80 % del área total del plato y, de ésta, el 20 % se destina a 400 orificios de paso, cada uno con diámetro equivalente al 2 % del diámetro del plato. La altura del canal de desagüe (downcomer) es de 0.05 m, con una lámina líquida sobre el mismo de 0.05 m.

Nuestra simulación numérica convergió en 85 iteraciones principales.

Cuadro 4

Temperaturas, presiones y flujos de líquido y vapor en cada nivel de plato

T [K]	P [Pa]	L [kmol/h]	V [kmol/h]
230.19	101325.00	216.96	0.00
242.45	101850.15	197.80	383.03
249.06	102388.44	188.70	363.80
252.29	102932.39	185.38	354.70
253.77	103478.89	183.84	351.38
254.59	104026.89	182.82	349.84
255.20	104576.02	181.99	348.82
255.72	105126.11	181.27	347.99
256.19	105677.06	180.65	347.27
256.61	106228.73	180.12	346.65
256.98	106781.00	179.69	346.12
257.31	107333.76	179.33	345.69
257.60	107886.92	179.06	345.33
257.85	108440.38	359.51	345.06
265.47	109003.14	355.80	325.51
268.81	109569.83	354.81	321.80
270.34	110138.46	354.10	320.81
271.23	110708.37	353.45	320.10
271.90	111279.28	352.88	319.45
272.46	111851.02	352.41	318.88
272.95	112423.45	352.03	318.41
273.38	112996.45	351.75	318.03
273.75	113569.93	34.00	317.75

Cuadro 5*Densidades de fase y velocidades de vapor en cada nivel de plato*

ρ_L [kg/m ³]	ρ_V [kg/m ³]	u_{\min} [m/s]	u [m/s]	u_{\max} [m/s]
511.12	2.15	0.00	0.00	0.00
533.23	2.34	0.97	1.49	1.61
546.67	2.42	0.95	1.45	1.60
552.46	2.47	0.94	1.42	1.60
555.06	2.49	0.93	1.41	1.59
556.59	2.51	0.93	1.40	1.59
557.75	2.52	0.93	1.39	1.59
558.73	2.53	0.93	1.38	1.59
559.59	2.54	0.93	1.38	1.59
560.33	2.55	0.93	1.37	1.58
560.95	2.56	0.93	1.36	1.58
561.45	2.57	0.93	1.35	1.58
561.85	2.58	0.93	1.35	1.58
562.16	2.59	0.93	1.34	1.57
571.72	2.74	0.91	1.30	1.54
575.75	2.81	0.90	1.29	1.53
577.74	2.84	0.90	1.29	1.52
579.04	2.85	0.90	1.28	1.52
580.06	2.86	0.90	1.28	1.52
580.90	2.87	0.90	1.27	1.52
581.61	2.88	0.90	1.26	1.52
582.20	2.89	0.90	1.26	1.52
582.68	2.90	0.90	1.25	1.51

Cuadro 6

Fracciones molares líquidas de etano, propano, i-butano y n-butano por plato

x_{etano}	x_{propano}	$x_{\text{i-butano}}$	$x_{\text{n-butano}}$
0.05	0.75	0.19	0.02
0.01	0.48	0.45	0.06
0.00	0.30	0.59	0.12
0.00	0.22	0.61	0.17
0.00	0.20	0.59	0.21
0.00	0.19	0.56	0.25
0.00	0.18	0.52	0.30
0.00	0.18	0.48	0.33
0.00	0.18	0.45	0.37
0.00	0.18	0.42	0.40
0.00	0.17	0.40	0.42
0.00	0.17	0.38	0.44
0.00	0.17	0.36	0.46
0.00	0.17	0.35	0.47
0.00	0.06	0.36	0.59
0.00	0.02	0.32	0.66
0.00	0.00	0.27	0.72
0.00	0.00	0.22	0.77
0.00	0.00	0.18	0.82
0.00	0.00	0.14	0.86
0.00	0.00	0.11	0.89
0.00	0.00	0.08	0.92
0.00	0.00	0.06	0.94

Cuadro 7

Fracciones vaporizadas de etano, propano, i-butano y n-butano por plato

<i>y</i> _{etano}	<i>y</i> _{propano}	<i>y</i> _{i-butano}	<i>y</i> _{n-butano}
0.28	0.67	0.04	0.00
0.05	0.75	0.19	0.02
0.03	0.60	0.33	0.04
0.02	0.51	0.40	0.07
0.02	0.47	0.41	0.09
0.02	0.46	0.40	0.12
0.02	0.45	0.38	0.14
0.02	0.45	0.36	0.16
0.02	0.45	0.34	0.18
0.02	0.45	0.33	0.20
0.02	0.45	0.31	0.22
0.02	0.45	0.30	0.23
0.02	0.45	0.29	0.24
0.02	0.45	0.28	0.25
0.00	0.19	0.38	0.43
0.00	0.06	0.39	0.55
0.00	0.02	0.35	0.63
0.00	0.01	0.29	0.70
0.00	0.00	0.24	0.76
0.00	0.00	0.19	0.81
0.00	0.00	0.15	0.85
0.00	0.00	0.12	0.88
0.00	0.00	0.09	0.91

Análisis de resultados

Los resultados numéricos obtenidos permiten validar el comportamiento interno de la columna de destilación, así como evaluar la coherencia físico-química del diseño propuesto. A continuación, se realiza un análisis detallado de cada conjunto de variables:

1. Temperatura y presión:

Las temperaturas en la columna aumentan desde 230.19 K en el plato superior hasta 273.75 K en el plato inferior. Este comportamiento es completamente consistente con el gradiente térmico característico de una columna de destilación: el condensador enfría el tope mientras que el rehervidor calienta el fondo. Además, las presiones aumentan ligeramente de 101 325 Pa hasta 113 569.93 Pa, lo cual concuerda con las caídas de presión acumuladas por capilaridad y flujos a través de platos y orificios. La magnitud del incremento (aproximadamente 12 245 Pa) es razonable para una columna de 23 etapas con espaciado de 0.85 m entre platos, y sugiere un diseño hidráulico sin excesivas pérdidas de carga.

2. Flujos de líquido y vapor:

El flujo descendente de líquido L disminuye de $216.96 \text{ kmol h}^{-1}$ en la parte superior a 34 kmol h^{-1} en el plato 23, mientras que el flujo ascendente de vapor V muestra la tendencia opuesta, aumentando desde 0 hasta $317.75 \text{ kmol h}^{-1}$. Esta evolución es coherente con la entrada neta de alimentación en el plato 13 y la contribución del rehervidor, que aporta vapor al sistema, mientras que el condensador extrae vapor en el tope. La relación de estos flujos con los valores de destilado ($D = 166 \text{ kmol h}^{-1}$) y fondos ($B = 34 \text{ kmol h}^{-1}$) valida las condiciones de diseño: la suma de D y B coincide con el caudal alimentado de 200 kmol h^{-1} , y el punto de inflexión de los flujos (plato 13) corresponde exactamente con la ubicación de la alimentación, lo que demuestra consistencia en el balance de materia.

3. Densidades de fase:

Las densidades del líquido ρ_L aumentan progresivamente desde 511.12 kg m^{-3} en el plato superior hasta 582.68 kg m^{-3} en el plato inferior, lo que refleja la acumulación de componentes más pesados (n-butano e i-butano) en la base, como es esperado en procesos de separación por volatilidad. Por otro lado, la densidad de vapor ρ_V también aumenta ligeramente (de 2.15 kg m^{-3} a 2.90 kg m^{-3}), sugiriendo un enriquecimiento del vapor en especies más pesadas conforme desciende por la columna. Esta variación es físicamente plausible, dado que el etano (el componente más volátil) abandona mayormente por el tope.

4. Velocidades de vapor:

Las velocidades reales u de vapor se mantienen entre 1.25 m/s y 1.49 m/s , siempre dentro del intervalo permisible entre u_{\min} y u_{\max} calculado por criterios de diseño hidráulico. Esta observación indica que no se presentan fenómenos no deseados como goteo (weeping) ni inundación (flooding). Además, la tendencia decreciente de u se relaciona directamente con el decremento del flujo de vapor.

5. Fracciones molares líquidas y vaporizadas:

En las etapas altas (platos 1-4) la fase líquida está enriquecida en etano y propano, con x_{etano} decreciendo desde 0.05 hasta 0.00 y x_{propano} desde 0.75 hasta 0.22, mientras que $x_{\text{n-butano}}$ aumenta de 0.02 a 0.17. Esto refleja la volatilidad relativa de estos componentes y confirma que el etano se arrastra preferentemente hacia la cabeza de la columna. Por su parte, las fracciones vaporizadas y_{etano} y y_{propano} en esas mismas etapas disminuyen de 0.28 a 0.02 y de 0.67 a 0.51, respectivamente, indicando un equilibrio sólido entre fases.

Hacia el centro de la columna (platos 5-15), $x_{\text{i-butano}}$ alcanza su máximo (0.61 en el plato 4-5) y luego decrece gradualmente hasta 0.35, mientras que $x_{\text{n-butano}}$ sube de 0.21 a 0.47, lo que es característico de la zona de stripping intermedia. Simultáneamente, las y correspondientes muestran comportamientos análogos: $y_{\text{i-butano}}$ cae de 0.40 a 0.28 y

$y_{\text{n-butano}}$ aumenta de 0.07 a 0.25, confirmando que el vapor extrae progresivamente los butanos hacia abajo.

En las etapas bajas (platos 16-23), casi todo el etano y propano han sido removidos ($x_{\text{etano}} = x_{\text{propano}} = 0$), mientras que $x_{\text{i-butano}}$ y $x_{\text{n-butano}}$ se estabilizan alrededor de 0.06-0.27 y 0.72-0.94, respectivamente. Las fracciones vaporizadas finales indican un $y_{\text{n-butano}}$ superior al 0.91, demostrando que el fondo se enriquece casi exclusivamente en n-butano. Este perfil concuerda con las expectativas teóricas de fraccionamiento multicomponente y valida la posición de alimentación y la relación de reflujo elegidas.

En conjunto, los datos presentados reflejan un diseño coherente desde el punto de vista termodinámico, hidrodinámico y estructural. La progresión esperada de temperaturas, presiones, flujos, densidades y velocidades respeta los principios fundamentales de la destilación fraccionada, y las cifras resultantes se encuentran dentro de rangos técnicos y operativos típicos para sistemas multicomponente bajo condiciones industriales moderadas. Por lo tanto, se puede concluir que el modelo y sus parámetros conducen a un comportamiento físico realista y técnicamente viable.

Análisis hidrodinámico

Número de Reynolds

El número de Reynolds (Re) de la fase vapor en cada plato se calculó como:

$$Re = \frac{\rho_v u_v D_h}{\mu_v}$$

La viscosidad de mezcla μ_v [Pa s] se halló aplicando la regla de Wilke:

$$\mu_v = \frac{\sum_{i=1}^n y_i \mu_i(T_j)}{\sum_{k=1}^n y_k \Phi_{ik}}, \quad \text{con} \quad \Phi_{ik} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \sqrt{\frac{\mu_i(T_j)}{\mu_k(T_j)}} \sqrt{\frac{M_k}{M_i}} \right)^2 \sqrt{\frac{M_i}{M_k}}$$

La viscosidad pura de un componente a cierta temperatura es $\mu_i(T_j)$, bajo una presión de 101325 Pa. Para su cálculo, se empleó un polinomio de regresión de segundo grado ajustado a datos experimentales reportados en la base de datos del NIST. Por otro lado, el cálculo del parámetro Φ_{ik} se llevó a cabo para cada par posible de componentes en la mezcla, resultando en un total de 16 combinaciones.

Plato	0	1	2	3	4	5	6	7
Reynolds	0	25059.20	24953.07	24880.61	24838.57	24769.36	24686.47	24602.94

8	9	10	11	12	13	14	15
24525.04	24455.40	24394.81	24343.00	24299.10	24261.87	24785.70	25324.50

16	17	18	19	20	21	22
25504.82	25504.95	25448.61	25382.82	25322.15	25270.21	25227.63

Cuadro 8

Número de Reynolds de la fase vapor

Los valores de Re ($> 2 \cdot 10^4$) indican un flujo turbulento en los platos 1-22. El plato 0 (condensador) registra $Re = 0$ pues no hay circulación de vapor hacia el interior. Las variaciones entre $\approx 2.45 \times 10^4$ y $\approx 2.55 \times 10^4$ responden a cambios en densidad y velocidad locales, asegurando condiciones óptimas de transferencia de masa y calor.

Tiempos de Residencia

El tiempo de residencia (t_{res}) del líquido en cada plato se definió como

$$t_{\text{res}} = \frac{V_l}{\dot{V}_l},$$

donde $V_l = A_{\text{ac}} h_l$ representa el volumen de líquido en la etapa y $\dot{V}_l = \dot{m}_l / \rho_l$ corresponde al flujo volumétrico de líquido [m³/s]. El valor de \dot{m}_l se obtuvo a partir de L_j , expresado en flujo molar [kmol/h], y la masa molar promedio de la mezcla. La densidad líquida ρ_l se utilizó para completar el cálculo. En la práctica, se empleó:

$$t_{\text{res},j} = \frac{A_{\text{ac}} h_l}{\dot{m}_l / \rho_l} \times 3600,$$

de modo que $t_{\text{res},j}$ queda en segundos.

Plato	0	1	2	3	4	5	6	7
Tiempo [s]	26.49	27.36	27.96	28.22	28.40	28.57	28.72	28.87

Plato	8	9	10	11	12	13	14	15
Tiempo [s]	28.99	29.10	29.19	29.27	29.33	14.61	14.58	14.58

Plato	16	17	18	19	20	21	22
Tiempo [s]	14.62	14.67	14.71	14.75	14.79	14.81	153.37

Cuadro 9

Tiempos de residencia del líquido en cada plato

Los tiempos en los platos 0-12 (26-2 s) son típicos para una altura de película líquida de 10 cm (la asumida). A partir del plato 13 (alimentación) el mayor flujo de líquido reduce t_{res} a 14.5 s en las etapas 13-21. El plato 22 (rehervidor) registra 153.37 s debido a su bajo flujo líquido relativo y su función de acumulador térmico. Estos resultados muestran la variación de la permanencia líquida desde el condensador hasta el rehervidor, confirmando parámetros de operación adecuados.

Validación de los resultados obtenidos

La verificación del modelo computacional desarrollado en Python se realizará mediante la comparación de resultados con una simulación efectuada en DWSIM, bajo las mismas condiciones operativas y parámetros de alimentación. En DWSIM se empleará el modelo termodinámico de Peng-Robinson como referencia. Esta comparación permitirá evaluar la capacidad del modelo propio para predecir el comportamiento del sistema, así como identificar posibles desviaciones atribuibles a las simplificaciones o suposiciones incorporadas durante su formulación.

Se presentan tablas comparativas donde se muestra el error relativo porcentual de las variables calculadas, tomando como referencia los resultados obtenidos en DWSIM. El error se define mediante la siguiente expresión:

$$\left| \frac{X_{Python} - X_{DWSIM}}{X_{DWSIM}} \right| \times 100$$

En los casos en el que el valor de DWSIM sea igual a cero (como puede ocurrir en las fracciones líquido y vapor), el error relativo no está definido. En dichas situaciones, se reportará el error absoluto, representado como n_{EA} , calculado según:

$$|X_{Python} - X_{DWSIM}|$$

Cuando ambos valores, el del modelo en Python y el de DWSIM, sean exactamente cero, se indicará con un guion (-) en la tabla, lo cual denota coincidencia total entre ambos y la inexistencia de error medible.

Perfil de Temperatura por etapa

Figura 5

Temperatura en Kelvin

Python	DWSIM	Error relativo (%)
230,19	228,27	0,84
242,45	241,52	0,39
249,06	248,03	0,42
252,29	251,35	0,37
253,77	253,02	0,30
254,59	254,00	0,23
255,20	254,71	0,19
255,72	255,32	0,16
256,19	255,87	0,13
256,61	256,38	0,09
256,98	256,84	0,05
257,31	257,26	0,02
257,60	263,93	2,40
257,85	267,18	3,49
265,47	268,76	1,22
268,81	269,68	0,32
270,34	270,40	0,02
271,23	271,06	0,06
271,90	271,72	0,07
272,46	272,38	0,03
272,95	273,03	0,03
273,38	273,66	0,10
273,75	274,24	0,18

Perfil de Presión por etapa

Figura 6

Presión en Pascal

Python	DWSIM	Error relativo (%)
101325.00	101325	0.00
101850.15	101325	0.52
102388.44	101908	0.47
102932.39	102491	0.43
103478.89	103074	0.39
104026.89	103657	0.36
104576.02	104240	0.32
105126.11	104824	0.29
105677.06	105407	0.26
106228.73	105990	0.23
106781.00	106573	0.20
107333.76	107156	0.17
107886.92	107739	0.14
108440.38	108322	0.11
109003.14	108905	0.09
109569.83	109488	0.07
110138.46	110071	0.06
110708.37	110654	0.05
111279.28	111238	0.04
111851.02	111821	0.03
112423.45	112404	0.02
112996.45	112987	0.01
113569.93	113570	0.00

Flujo molar de líquido por etapa

Figura 7

Flujo molar líquido (kmol/h)

DWSIM	Python	Error relativo (%)
216.98	216.96	0.01
208.00	197.80	4.91
203.66	188.70	7.35
201.83	185.38	8.15
200.71	183.84	8.40
199.77	182.82	8.49
198.91	181.99	8.51
198.12	181.27	8.50
197.41	186.65	5.45
196.78	180.12	8.47
196.25	179.69	8.44
196.18	179.33	8.59
197.88	179.06	9.51
198.48	359.51	81.13
198.62	355.80	79.13
198.50	354.81	78.75
198.26	354.10	78.61
197.97	353.45	78.54
197.67	352.88	78.52
197.38	352.41	78.54
197.12	352.03	78.59
196.89	351.75	78.65
BR = 4.793	34.00	-

Flujo molar de vapor por etapa

Figura 8

Flujo molar vapor (kmol/h)

DWSIM	Python	Error relativo (%)
RR = 1.307	0.00	-
383.00	383.03	0.01
374.02	363.80	2.73
369.68	354.70	4.05
367.84	351.38	4.48
366.72	349.84	4.60
365.79	348.82	4.64
364.93	347.99	4.64
364.14	347.27	4.63
363.42	346.65	4.62
362.80	346.12	4.60
362.26	345.69	4.58
163.03	345.33	111.82
163.89	345.06	110.54
164.50	325.51	97.88
164.64	321.80	95.46
164.51	320.81	95.00
164.27	320.10	94.86
163.98	319.45	94.81
163.68	318.88	94.82
163.40	318.41	94.87
163.13	318.03	94.95
162.91	317.75	95.05

Perfil de composición Líquida por etapa en DWSIM

Figura 9

Composición líquida x

Etano	Propano	N-butano	Isobutano
0.05	0.75	0.02	0.19
0.01	0.50	0.06	0.44
0.00	0.33	0.10	0.57
0.00	0.25	0.15	0.60
0.00	0.22	0.19	0.59
0.00	0.20	0.23	0.56
0.00	0.19	0.28	0.53
0.00	0.19	0.32	0.49
0.00	0.19	0.35	0.46
0.00	0.18	0.39	0.43
0.00	0.18	0.42	0.40
0.00	0.18	0.44	0.38
0.00	0.07	0.50	0.43
0.00	0.03	0.55	0.43
0.00	0.01	0.58	0.41
0.00	0.00	0.62	0.38
0.00	0.00	0.66	0.34
0.00	0.00	0.70	0.30
0.00	0.00	0.74	0.26
0.00	0.00	0.78	0.22
0.00	0.00	0.82	0.18
0.00	0.00	0.86	0.14
0.00	0.00	0.90	0.10

Perfil de composición Líquida por etapa en Python

Figura 10

Composición líquida x

Etano	Propano	N-butano	Isobutano
0.05	0.75	0.02	0.19
0.01	0.48	0.06	0.45
0.00	0.30	0.12	0.59
0.00	0.22	0.17	0.61
0.00	0.20	0.21	0.59
0.00	0.19	0.25	0.56
0.00	0.18	0.30	0.52
0.00	0.18	0.33	0.48
0.00	0.18	0.37	0.45
0.00	0.18	0.40	0.42
0.00	0.17	0.42	0.40
0.00	0.17	0.44	0.38
0.00	0.17	0.46	0.36
0.00	0.17	0.47	0.35
0.00	0.06	0.59	0.36
0.00	0.02	0.66	0.32
0.00	0.00	0.72	0.27
0.00	0.00	0.77	0.22
0.00	0.00	0.82	0.18
0.00	0.00	0.86	0.14
0.00	0.00	0.89	0.11
0.00	0.00	0.92	0.08
0.00	0.00	0.94	0.06

Error relativo de composición líquida

Figura 11

Error relativo porcentual (%)

Etano	Propano	N-butano	Isobutano
0.00	0.00	0.00	0.00
0.00	4.00	0.00	2.27
-	9.09	20.00	3.51
-	12.00	13.33	1.67
-	9.09	10.53	0.00
-	5.00	8.70	0.00
-	5.26	7.14	1.89
-	5.26	3.13	2.04
-	5.26	5.71	2.17
-	0.00	2.56	2.33
-	5.56	0.00	0.00
-	5.56	0.00	0.00
-	142.86	8.00	16.28
-	466.67	14.55	18.60
-	500.00	1.72	12.20
-	0.02 _{EA}	6.45	15.79
-	-	9.09	20.59
-	-	10.00	26.67
-	-	10.81	30.77
-	-	10.26	36.36
-	-	8.54	38.89
-	-	6.98	42.86
-	-	4.44	40.00

Perfil de composición de vapor por etapa en DWSIM

Figura 12

Composición de vapor y

Etano	Propano	N-butano	Isobutano
0.29	0.66	0.04	0.00
0.05	0.75	0.19	0.02
0.03	0.61	0.33	0.04
0.02	0.52	0.40	0.06
0.02	0.47	0.41	0.09
0.02	0.46	0.41	0.11
0.02	0.45	0.39	0.14
0.02	0.45	0.37	0.16
0.02	0.44	0.35	0.18
0.02	0.44	0.34	0.20
0.02	0.44	0.32	0.22
0.02	0.44	0.30	0.23
0.00	0.21	0.44	0.34
0.00	0.09	0.49	0.42
0.00	0.03	0.50	0.47
0.00	0.01	0.47	0.52
0.00	0.00	0.43	0.56
0.00	0.00	0.39	0.61
0.00	0.00	0.34	0.66
0.00	0.00	0.29	0.71
0.00	0.00	0.24	0.76
0.00	0.00	0.19	0.81
0.00	0.00	0.15	0.85

Perfil de composición de vapor por etapa en Python

Figura 13

Composición de vapor y

Etano	Propano	N-butano	Isobutano
0.28	0.67	0.04	0.00
0.05	0.75	0.19	0.02
0.03	0.60	0.33	0.04
0.02	0.51	0.40	0.07
0.02	0.47	0.41	0.09
0.02	0.46	0.40	0.12
0.02	0.45	0.38	0.14
0.02	0.45	0.36	0.16
0.02	0.45	0.34	0.18
0.02	0.45	0.33	0.20
0.02	0.45	0.31	0.22
0.02	0.45	0.30	0.23
0.02	0.45	0.29	0.24
0.02	0.45	0.28	0.25
0.00	0.19	0.38	0.43
0.00	0.06	0.39	0.55
0.00	0.02	0.35	0.63
0.00	0.01	0.29	0.70
0.00	0.00	0.24	0.76
0.00	0.00	0.19	0.81
0.00	0.00	0.15	0.85
0.00	0.00	0.12	0.88
0.00	0.00	0.09	0.91

Error relativo de omposición de vapor

Figura 14

Error relativo porcentual (%)

Etano	Propano	N-butano	Isobutano
3.45	1.52	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00	0.00
0.00	1.64	0.00	0.00
0.00	1.92	0.00	16.67
0.00	0.00	0.00	0.00
0.00	0.00	2.44	9.09
0.00	0.00	2.56	0.00
0.00	0.00	2.70	0.00
0.00	2.27	2.86	0.00
0.00	2.27	2.94	0.00
0.00	2.27	3.13	0.00
0.00	2.27	0.00	0.00
0.02 _{EA}	114.29	34.09	29.41
0.02 _{EA}	400.00	42.86	40.48
-	533.33	24.00	8.51
-	500.00	17.02	5.77
-	0.02 _{EA}	18.60	12.50
-	0.01 _{EA}	25.64	14.75
-	-	29.41	15.15
-	-	34.48	14.08
-	-	37.50	11.84
-	-	36.84	8.64
-	-	40.00	7.06

Densidad de vapor por etapa

Figura 15

Densidad de vapor ρ_v (kg/m^3)

DWSIM	Python	Error relativo (%)
2.17	2.15	0.92
2.33	2.34	0.43
2.41	2.42	0.41
2.46	2.47	0.41
2.49	2.49	0.00
2.51	2.51	0.00
2.52	2.52	0.00
2.53	2.53	0.00
2.54	2.54	0.00
2.55	2.55	0.00
2.56	2.56	0.00
2.57	2.57	0.00
2.70	2.58	4.44
2.78	2.59	6.83
2.81	2.74	2.49
2.83	2.81	0.71
2.84	2.84	0.00
2.85	2.85	0.00
2.86	2.86	0.00
2.87	2.87	0.00
2.88	2.88	0.00
2.89	2.89	0.00
2.89	2.90	0.35

Densidad del líquido por etapa

Figura 16

Densidad del líquido ρ_L (kg/m^3)

DWSIM	Python	Error relativo (%)
589.05	511.12	13.23
592.35	533.23	9.98
594.45	546.67	8.04
595.43	552.46	7.22
595.98	555.06	6.87
596.40	556.59	6.68
596.77	557.75	6.54
597.10	558.73	6.43
597.39	559.59	6.33
597.63	560.33	6.24
597.81	560.95	6.17
597.94	561.45	6.10
597.92	561.85	6.03
597.80	562.16	5.96
597.78	571.72	4.36
597.84	575.75	3.69
597.95	577.74	3.38
598.09	579.04	3.19
598.24	580.06	3.04
598.39	580.90	2.92
598.52	581.61	2.83
598.63	582.20	2.74
598.71	582.68	2.68

Tensión superficial por etapa

Figura 17

Tensiones superficiales σ (N/m)

DWSIM	Python	Error relativo %
0.01604	0.01599	0.34
0.01604	0.01552	3.27
0.01604	0.01526	4.89
0.01604	0.01513	5.70
0.01604	0.01510	5.88
0.01604	0.01511	5.82
0.01604	0.01514	5.63
0.01604	0.01516	5.51
0.01604	0.01518	5.38
0.01604	0.01520	5.26
0.01604	0.01521	5.20
0.01604	0.01522	5.14
0.01604	0.01522	5.14
0.01604	0.01522	5.14
0.01604	0.01479	7.82
0.01604	0.01463	8.81
0.01604	0.01460	9.00
0.01604	0.01460	9.00
0.01604	0.01461	8.94
0.01604	0.01463	8.81
0.01604	0.01464	8.75
0.01604	0.01464	8.75
0.01604	0.01464	8.75

Velocidad de vapor

Dado que el software DWSIM no proporciona el rango de velocidades de vapor, se recurre a referencias bibliográficas para validar los valores empleados.

En el trabajo de Ramírez (2020), se estudia un sistema binario anilina-agua, donde se calcula la velocidad máxima de vapor utilizando la correlación de Souders-Brown —la misma empleada en este trabajo—, obteniendo un valor de 3.23 m/s. La velocidad de operación se estimó como el 75 % de este valor, resultando en 2.42 m/s.

Por su parte, Group (2011) analiza un sistema binario pentano-hexano y reporta velocidades típicas en el rango de 0.3 a 2.3 m/s.

Estas referencias permiten concluir que las velocidades de operación, mínima y máxima, dependen significativamente de las propiedades del sistema estudiado. En consecuencia, los valores utilizados en este trabajo resultan coherentes con la bibliografía consultada.

Justificación de errores relativos

Cabe destacar que, en ciertos casos, se observan errores relativos elevados entre los resultados obtenidos con el modelo en Python y los reportados por DWSIM. Estas discrepancias pueden atribuirse a diversos factores, tales como diferencias en los métodos numéricos empleados, simplificaciones o suposiciones adoptadas en la formulación del modelo propio, así como a la sensibilidad inherente de algunas variables a pequeñas variaciones en las condiciones de operación o composición.

Temperatura y Presión. Los perfiles de temperatura y presión tienen un error relativo muy bajo, lo que indica una buena precisión en ambos modelos.

Flujo molar de líquido y vapor. El flujo molar de líquido y vapor presenta errores relativos que oscilan entre el 4.91 % y el 9.51 %, lo cual, aunque elevado, puede considerarse aceptable dadas las limitaciones del modelo. Sin embargo, en la etapa de alimentación, el error se incrementa de forma significativa, superando el 75 %.

A pesar de estas discrepancias, el modelo desarrollado en *Python* muestra un comportamiento más coherente con el planteamiento del problema. Dado que se especificó

que la alimentación consiste en líquido saturado, es esperable observar un mayor flujo molar de líquido en las etapas posteriores a la alimentación y menor en las anteriores. Esta tendencia es reproducida por el modelo de *Python*, pero no por el simulador *DWSIM*.

En el caso de *DWSIM*, se observa una inversión de esta lógica, lo que sugiere que el simulador interpreta que la corriente de alimentación está compuesta mayoritariamente por vapor. Esta discrepancia puede deberse al paquete termodinámico utilizado en la simulación, que, en función de las condiciones de entrada, clasifica erróneamente la alimentación como vapor saturado. Cabe destacar que en ambos modelos se estableció explícitamente que la corriente de entrada corresponde a líquido saturado.

Composición de líquido y vapor. Con respecto al flujo molar de líquido, se observa que en algunas etapas el error relativo es muy bajo, e incluso nulo, mientras que en otras etapas puede alcanzar valores elevados. Un comportamiento similar se presenta en la composición del vapor, lo que permite concluir que existen etapas en las que ambos modelos —*Python* y *DWSIM*— coinciden con alta precisión, pero también hay etapas en las que presentan discrepancias significativas.

Los errores elevados en ciertas etapas pueden atribuirse a una combinación de factores, como la sensibilidad numérica del modelo, diferencias en la estimación de propiedades termodinámicas, y el impacto de las condiciones de borde establecidas en cada simulación.

Densidad de vapor. El error relativo de la densidad de vapor en cada etapa es menor al 1 %, lo que indica que ambos modelos tienen buena precisión.

Densidad de líquido. El error relativo en la primera etapa es del 13.23 %, y disminuye progresivamente en las etapas siguientes. El simulador *DWSIM* muestra un incremento más lento en la densidad del líquido en comparación con el modelo desarrollado en *Python*. Este último presenta un comportamiento más coherente, ya que, en las etapas superiores de la columna, es esperable una mayor acumulación de vapor en comparación con el fondo, lo que implica una menor densidad. Por lo tanto, se concluye que el modelo de *Python* representa de manera más fiel el perfil de densidad esperado en la columna.

Tensión superficial. Se observa que el error relativo en la estimación de la tensión superficial (σ) aumenta a medida que se avanza en la columna. Esto puede explicarse mediante la correlación de Brock-Bird, la cual describe cómo varía σ en función de las propiedades críticas y la temperatura. La expresión matemática es la siguiente:

$$\sigma = 1 \times 10^{-3} (0.132 \alpha_c - 0.278) P_c^{2/3} T_c^{1/3} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{11/9}$$

En esta ecuación, el término

$$\left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{11/9}$$

es el principal responsable de la disminución de la tensión superficial con el aumento de la temperatura T . Este comportamiento tiene un claro sentido físico, ya que al incrementar la temperatura, las fuerzas cohesivas entre las moléculas en la interfaz se reducen, lo que provoca una disminución de la tensión superficial.

A partir de este análisis, se concluye que el modelo desarrollado en *Python* presenta una mayor coherencia física, ya que reproduce adecuadamente la relación inversa entre temperatura y tensión superficial observada en los sistemas reales.

Representación gráfica del equipo

Como se indicó anteriormente, la columna diseñada consta de 21 platos y la alimentación se introduce en el plato número 12. En la figura 18 se muestra esquemáticamente la configuración de la columna:

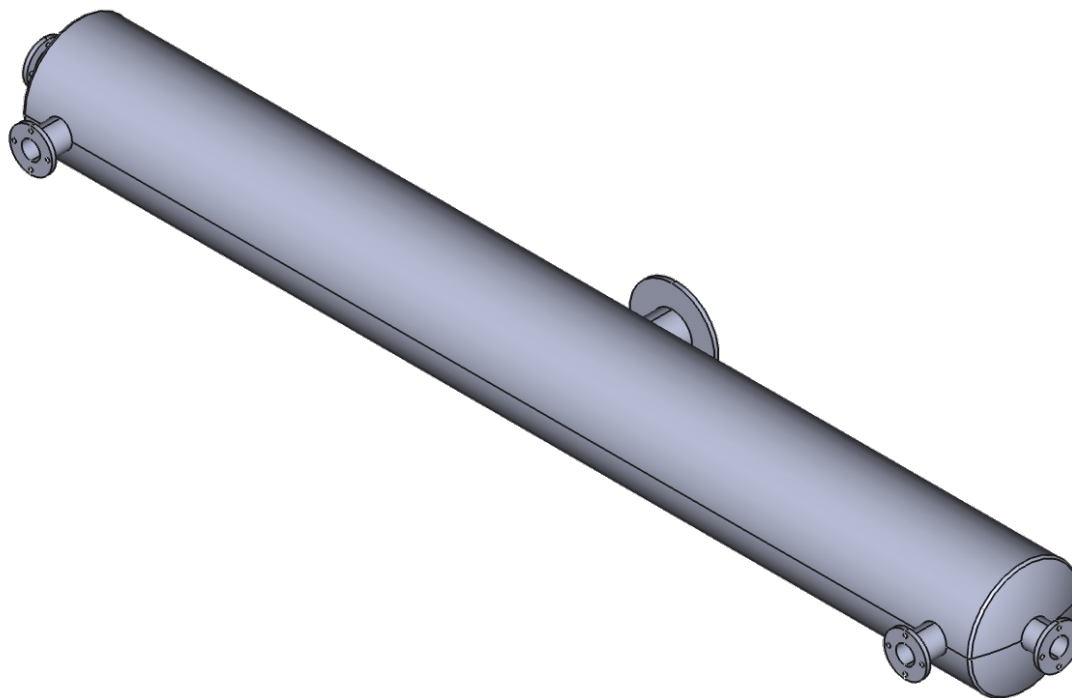


Figura 18

Columna de destilación multicomponente

Para los fines de la simulación, el condensador y el rehovidor se han considerado como platos (aunque en la realidad no lo son). Por este motivo, no se ha diseñado el condensador ni el rehovidor, ya que no forman parte del equipo principal (la columna).

Cada uno de los platos interiores de la columna corresponde a un plato perforado. Estos platos están dispuestos de tal manera que el líquido acumulado en la parte superior fluye hacia el plato inferior, mientras que el vapor ascendente atraviesa las perforaciones para alcanzar el plato superior. El diseño de los platos perforados se ilustra en la figura 19:

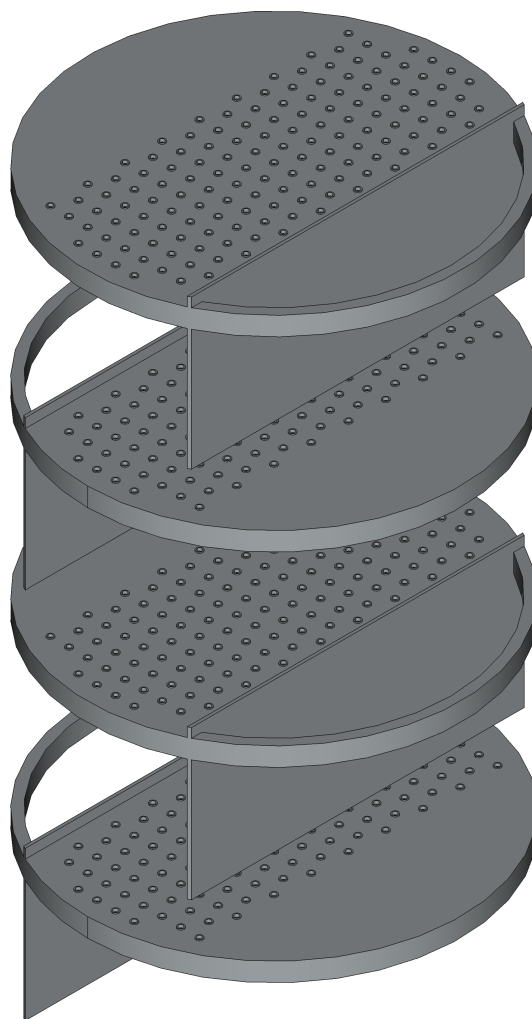


Figura 19

Platos perforados para destilación multicomponente

Análisis económico

Para calcular el precio base del casco, rehervidor, condensador y platos se emplea la siguiente correlación general:

$$C_0 = a + b S^n$$

donde a , b y n son coeficientes específicos de cada tipo de equipo, y S es la magnitud característica (Towler & Sinnott, 2013, p. 319).

Costo del Casco

1. Cálculo de la masa del casco

Se emplea la siguiente fórmula:

$$\text{Shellmass} = \pi D L \rho t$$

con los siguientes parámetros:

- Diámetro externo: $D = 1.5 \text{ m}$
- Altura del casco: $L = 22 \text{ m}$
- Espesor de pared: $t = 0.01 \text{ m}$
- Densidad del acero al carbono: $\rho = 7840 \text{ kg/m}^3$

$$\text{Shellmass} = \pi \cdot 1.5 \cdot 22 \cdot 7840 \cdot 0.01 = 8128 \text{ kg}$$

2. Cálculo del costo base del casco

Utilizando $S = W_{\text{kg}} = 8128 \text{ kg}$:

$$C_0 = -10\,000 + 600 \cdot (8128)^{0.6} = 123\,089 \text{ USD}$$

$$C_{\text{shell, base}} = 123\,089 \text{ USD}$$

Costo de Platos Tamizados

1. Costo base por plato

La correlación para un plato tamizado es:

$$C_{\text{plato}} = 100 + 120 \cdot D^2 \quad \text{con} \quad D = 1.5 \text{ m}$$

$$C_{\text{plato}} = 100 + 120 \cdot (1.5)^2 = 370 \text{ USD}$$

2. Costo total de los 21 platos

$$N = 21 \quad \Rightarrow \quad C_{\text{platos, base}} = 21 \cdot 370 = 7770 \text{ USD}$$

$$C_{\text{platos, base}} = 7770 \text{ USD}$$

Costo del Condensador Total

Se adopta un coeficiente de transferencia de calor de $U = 300 \text{ W/m}^2\cdot\text{K}$, valor típico para intercambiadores de tubos y coraza con mezcla orgánica ligera como fluido caliente (Towler & Sinnott, 2013, p. 797).

1. Cálculo de área de intercambio

$$Q = 6\,974\,045\,304.2 \text{ J/h} = 1\,937\,235.92 \text{ W}$$

Temperaturas:

- Entrada de vapor: $T_1 = 242.45^\circ\text{C}$
- Salida (condensado): $T_2 = 230.19^\circ\text{C}$

2. Temperatura logarítmica media

$$\Delta T_{\text{lm}} = \frac{T_1 - T_2}{\ln(T_1/T_2)} = \frac{12.26}{\ln(242.45/230.19)} \approx 236.2^\circ\text{C}$$

$$\boxed{\Delta T_{\text{lm}} = 236.2^\circ\text{C}}$$

3. Área de intercambio

$$A = \frac{Q}{U \cdot \Delta T_{\text{lm}}} = \frac{1937235.92}{300 \cdot 236.2} \approx 27.34 \text{ m}^2$$

$$\boxed{A_{\text{condensador}} = 27.34 \text{ m}^2}$$

4. Costo base del condensador

$$C_0 = 10\,000 + 88 \cdot A = 10\,000 + 88 \cdot 27.34 = 12\,406 \text{ USD}$$

$$\boxed{C_{\text{condensador, base}} = 12\,406 \text{ USD}}$$

Costo del Rehervidor Parcial

1. Área de intercambio

$$Q = 7\,088\,834\,364.34 \text{ J/h} = 1\,969\,120.65 \text{ W}$$

$$\Delta T_{\text{lm}} = 273.56^\circ\text{C}, \quad U = 300 \text{ W/m}^2\cdot\text{K}$$

$$A = \frac{1969120.65}{300 \cdot 273.56} \approx 24.0 \text{ m}^2$$

$$\boxed{A_{\text{rehervidor}} = 24.0 \text{ m}^2}$$

2. Costo base del rehervidor

$$C_0 = 10\,000 + 88 \cdot 24 = 12\,112 \text{ USD}$$

$C_{\text{rehervidor, base}} = 12\,112 \text{ USD}$

Actualización y Costo Total Instalado

El **CEPCI** (*Chemical Engineering Plant Cost Index*) es un índice ampliamente utilizado en ingeniería química para actualizar los costos asociados a equipos, instalaciones y plantas industriales a lo largo del tiempo. Este índice refleja las variaciones en los precios de materiales, mano de obra, equipos, construcción e instalación, por lo que constituye una herramienta estándar en la evaluación económica de proyectos químicos e industriales. El CEPCI de referencia corresponde al año 2006, ya que las ecuaciones de costo base están calibradas con ese valor (Towler & Sinnott, 2013, p. 321).

En esta evaluación se emplean los siguientes valores:

- **CEPCI de referencia (año base):** 478.6
- **CEPCI actual (2025):** 770

La actualización de los costos base se realiza mediante la siguiente relación:

$$C_{\text{actual}} = C_{\text{base}} \cdot \frac{\text{CEPCI}_{\text{actual}}}{\text{CEPCI}_{\text{base}}}$$

Para estimar el **costo total instalado** de cada componente, el costo actualizado se multiplica por un **factor de instalación**, que contempla los siguientes elementos (Perry & Green, 1997, p. 9-68):

- Desempaque y montaje del equipo
- Conexiones a servicios auxiliares o utilidades existentes

- Materiales y mano de obra de instalación
- Costos de ingeniería y gastos de campo
- Honorarios del contratista y contingencias

Los factores de instalación utilizados fueron tomados de (Luyben, 2021b).

Componente	Costo base (USD)	Costo actualizado (USD)
Shell	123 089	198 032
Platos	7770	12 501
Condensador	12 406	19 960
Rehervidor	12 112	19 487
Suma total		249 980

Componente	Factor instalación	Costo instalado (USD)
Shell	4.05	802 030
Platos	2.70	33 753
Condensador	3.22	64 271
Rehervidor	3.22	62 748
Suma total		962 802

Inversión total

La suma del costo actualizado de los equipos es de \$249,980 USD, mientras que el costo total de instalación asciende a \$962,802 USD. Al ambos montos, se obtiene un costo total de \$1,212,782 USD, el cual representa la inversión completa incluyendo tanto los equipos como su instalación.

Impacto ambiental

El **Potencial de Calentamiento Global (GWP)** es un índice que mide la capacidad de un gas para atrapar calor en la atmósfera en comparación con el CO₂ durante un período de referencia (generalmente 100 años). Cuanto mayor es el GWP, más contribuye ese gas al calentamiento global por unidad de masa emitida.

Los compuestos con los que opera la columna de destilación (etano, propano, n-butano e i-butano) presentan un GWP individual que varía aproximadamente entre 2,8 y 5,5 (considerando un horizonte de 100 años). Por lo tanto, si se producen fugas y estos hidrocarburos se liberan sin combustión, cada kilogramo emitido contribuye con entre 2,8 y 5,5 kg de CO₂ equivalente al balance de gases de efecto invernadero, intensificando el cambio climático y sus consecuencias (aumento de temperaturas, alteración de patrones climáticos, derretimiento de glaciares, etc.).

Contribución conjunta

- **Huella de carbono industrial.** La suma de fugas fugitivas de etano, propano, n-butano e i-butano eleva la huella de carbono equivalente del proceso, ya que cada fuga aporta CO₂ equivalente según su GWP y el volumen manejado.
- **Smog fotoquímico.** Al comportarse todos ellos como compuestos orgánicos volátiles (COV), la mezcla del GLP en la atmósfera favorece las reacciones fotoquímicas que generan ozono troposférico y componentes de smog, deteriorando la calidad del aire y afectando salud respiratoria y vegetación.
- **Riesgo de ignición.** La estrecha ventana inflamable de la mezcla y su tendencia a acumularse en zonas bajas o recintos cerrados incrementan la posibilidad de ignición y explosiones, con liberación masiva de hidrocarburos al ambiente.

Conclusión

Se desarrolló un diseño completo de una columna de destilación multicomponente, específicamente orientado a maximizar la recuperación de gases ligeros (etano, propano, i-butano y n-butano) presentes en el destilado de petróleo crudo. El proyecto integró fundamentos teóricos y herramientas prácticas, permitiendo abordar el sistema desde una visión profunda y aplicada de la ingeniería química.

Se aplicaron de forma articulada los tres fenómenos de transporte (masa, energía y momento), demostrando su interdependencia en la operación estable y eficiente de la columna. A través del desarrollo de un modelo matemático robusto y su resolución numérica, se logró predecir con precisión el comportamiento del sistema bajo condiciones industriales realistas.

Los balances de masa y energía, las relaciones de equilibrio líquido-vapor y las restricciones hidráulicas permitieron establecer los parámetros operativos óptimos, obteniendo resultados que concuerdan con referencias bibliográficas y simulaciones computacionales. El enfoque numérico empleado, basado en métodos iterativos y criterios estrictos de convergencia, permitió capturar la complejidad del sistema sin recurrir a simplificaciones excesivas, facilitando la adaptación del diseño a distintas condiciones de operación y mezclas de alimentación.

Finalmente, se incluyeron correlaciones para estimar el costo de la columna y su instalación, así como un análisis específico del impacto ambiental asociado al proceso.

Referencias

- Cengel, Y., & Boles, M. (2013). *Termodinámica* (8.^a ed.). McGraw-Hill.
- de Valencia, U. (2025). Demostración de la Ley de Raoult: Nucleación Heterogénea en el Frasco de Franklin Vertical [Consultado el 23 de marzo de 2025].
<https://tinyurl.com/5jpuktfb>
- dejac001. (2025). Distillation Simulation [Accedido: 2025-03-30].
<https://github.com/dejac001/distillation>
- Fiveable. (s.f.). Advanced Chemical Engineering Science Unit 4 - Transport Phenomena [Fecha de acceso: marzo 16, 2025].
<https://library.fiveable.me/advanced-chemical-engineering-science/unit-4>
- Gadalla, M. A., Olujic, Z., Jansens, P. J., Jobson, M., & Smith, R. (2005). Reducing CO₂ emissions and energy consumption of heat-integrated distillation systems. *Environmental Science & Technology*, 39(17), 6860-6870.
<https://doi.org/10.1021/es049795q>
- Galagvosky, L. R. (2002). *Química Orgánica: Fundamentos Teórico-Prácticos para el laboratorio* (Primera). Editorial Universitaria Buenos Aires.
- Green, D. W., & Perry, R. H. (2007). *Perry's Chemical Engineers' Handbook* (8.^a ed.) [ProQuest Ebook Central]. McGraw-Hill Professional Publishing.
- Greenberg, J. P., Friedli, H., Guenther, A. B., Hanson, D. R., Harley, P., & Karl, T. (2006). Volatile organic emissions from the distillation and pyrolysis of vegetation. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 6(1), 81-91.
<https://doi.org/10.5194/acp-6-81-2006>
- Group, K. T. (2011). *Distillation Column Selection and Sizing (Engineering Design Guidelines)* (Rev. 03) [Prepared by: Chew Yin Hoon (Rev 1), Ai Li Ling (Rev 2), Aprilia Jaya (Rev 3); Checked by: Karl Kolmetz]. Johor Bahru, Malaysia.
<https://www.klmttechgroup.com/PDF/EDG/ENGINEERING%20DESIGN%20GUIDELINES%20-%20distillation%20column.pdf>

- Hillestad, M. (2011). Chemical Engineering Plant Cost Index (averaged over year) [Accedido el 4 de junio de 2025].
- Igem. (s.f.). Introduction to Mass Transport.
<https://static.igem.org/mediawiki/2020/9/9a/T--Waterloo--TF5.pdf>
- Kuttler, K. (2024). 2.10: Factorización LU [Accedido el 6 de abril de 2025]. [https://espanol.libretexts.org/Matematicas/Algebra_lineal/Un_Primer_Curso_de_%C3%81lgebra_Lineal_\(Kuttler\)/02%3A_Matrices/2.10%3A_Factorizaci%C3%B3n_LU](https://espanol.libretexts.org/Matematicas/Algebra_lineal/Un_Primer_Curso_de_%C3%81lgebra_Lineal_(Kuttler)/02%3A_Matrices/2.10%3A_Factorizaci%C3%B3n_LU)
- Luyben, W. L. (2021a). Distillation Techniques [Accedido el 4 de junio de 2025].
- Luyben, W. L. (2021b). Installation Factors for Different Equipment [Tabla de factores de instalación para distintos equipos de proceso. Utilizada para calcular costos instalados a partir de costos base.].
- Misael. (2021a). Cálculos Rigurosos Para Etapas de Equilibrio: Ecuaciones MESH [Video de Youtube]. <https://www.youtube.com/watch?v=5OvuFDWkzns>
- Misael. (2021b). Método Fenske - Underwood - Gilliland Para Destilación Multicomponente [Video de Youtube]. <https://www.youtube.com/watch?v=5OvuFDWkzns>
- Niamnuy, C., Devahastin, S., Soponronnarit, S., & Raghavan, V. (2008). Modeling coupled transport phenomena and mechanical deformation of shrimp during drying in a jet spouted bed dryer. <https://tinyurl.com/5cctkktz>
- Ogle, R. (2017). Transport phenomena for dust combustion. https://www.researchgate.net/publication/311998579_Transport_phenomena_for_dust_combustion
- para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico, M. (2024). *Petróleo y comportamiento en el mar* [Consultado el 23 de marzo de 2025]. <https://tinyurl.com/3ny9d2su>
- Pérez, L. D. G. P. (2020). Laboratorio de Química Orgánica I, Sección 02 [Guatemala, 5 de marzo del 2020].
- Perry, R. H., & Green, D. W. (1997). *Perry's Chemical Engineers' Handbook* (D. W. Green & J. O. Maloney, Eds.; 7th). McGraw-Hill.

- Peters, M. S., & Timmerhaus, K. D. (1991). *Plant Design and Economics for Chemical Engineers* (4th). McGraw-Hill.
- Platzer, W. (2024). Momentum and Energy Transport. <https://tinyurl.com/mw9kwzyd>
- Ramírez, B. G. (2020). *Comparativa entre métodos utilizados en el diseño de platos perforados para columnas de destilación, mediante programación en hojas de cálculo Excel* [Tesis de licenciatura]. Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán [Tesis digital disponible en la Dirección General de Bibliotecas de la UNAM]. <https://tesis.unam.mx>
- Scribd. (s.f.). Transport Phenomena Summary.
<https://fr.scribd.com/document/445363413/Transport-phenomena-summary>
- StackExchange. (s.f.). "Energy transfer" and "Energy transport".
<https://tinyurl.com/3j9nnz95>
- Stieglitz, R., & Platzer, W. (s.f.). Momentum and Energy Transport. https://www.researchgate.net/publication/379501228_Momentum_and_Energy_Transport
- Subramanian, S. (s.f.). Energy Transport. <https://tinyurl.com/439hf6wt>
- Sustainable Operations for Distillation Columns. (2013). Sustainable Operations for Distillation Columns [Available via ResearchGate]. *unpublished report on ResearchGate*.
- Technology, E. I. (s.f.). Transport Phenomena in Our Life.
https://user.eng.umd.edu/~dimitrak/Courses/ENCH630_2004/LifeEx/index.html
- Towler, G., & Sinnott, R. (2013). *Chemical Engineering Design: Principles, Practice and Economics of Plant and Process Design* (2.^a ed.). Elsevier.
- Treybal, R. E. (1980). *Operaciones de transferencia de masa*. McGraw-Hill.
<https://tinyurl.com/bdduhzvz>
- Vidal, E. (2014). Constante de equilibrio K_i [Accedido: 2025-03-29].
<https://tinyurl.com/ms3np8tk>
- Wankat, P. C. (2012). *Separation Process Engineering* (3.^a ed.). Prentice Hall.

Wikibooks. (s.f.). A-level Physics/Health Physics/Transport Phenomena. [https:](https://en.wikibooks.org/wiki/A-level_Physics/Health_Physics/Transport_Phenomena)

[//en.wikibooks.org/wiki/A-level_Physics/Health_Physics/Transport_Phenomena](https://en.wikibooks.org/wiki/A-level_Physics/Health_Physics/Transport_Phenomena)

Wikipedia. (s.f.). Fenómenos de Transporte.

https://es.wikipedia.org/wiki/Fen%C3%B3menos_de_transporte

Wikipedia. (2024a). Columna de fraccionamiento [Consultado el 23 de marzo de 2025].

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

Wikipedia. (2024b). Destilación fraccionada [Consultado el 23 de marzo de 2025].

https://es.wikipedia.org/wiki/Destilaci%C3%B3n_fraccionada