

CAPÍTULO 2

APLICACIÓN DEL MÉTODO DE MCCABE-THIELE MEDIANTE MODELACIÓN MATEMÁTICA EN EXCEL PARA DETERMINAR LAS ETAPAS TEÓRICAS DE UNA DESTILACIÓN BINARIA

Data de submissão: 23/08/2024

Data de aceite: 01/10/2024

Wilson Patricio León Cueva

Universidad Técnica de Machala

Ecuador-Machala

<https://orcid.org/0000-0002-5474-430X>

Kely Romina Veintimilla San Martin

Universidad Técnica de Machala

Ecuador-Machala

<https://orcid.org/0009-0004-9263-1914>

Delly Maribel San Martin Torres

Universidad Técnica de Machala

Ecuador-Machala

<https://orcid.org/0000-0002-4680-4042>

Juliana Lisbeth Criollo Feijoo

Universidad Técnica de Machala

Ecuador-Machala

<https://orcid.org/0000-0002-8121-0880>

Jerling Samantha Hurtado González

Universidad Técnica de Machala

Ecuador-Machala

<https://orcid.org/0009-0001-5771-5854>

Cristina Vanessa Fernández Vélez

Universidad Técnica de Machala

Ecuador-Machala

<https://orcid.org/0000-0003-1256-405X>

RESUMEN: Este estudio se centra en la simulación de un proceso de destilación binaria de etanol y agua utilizando un modelo desarrollado en Excel, con el objetivo de obtener etanol con una pureza del 90%. La destilación es ampliamente reconocida como uno de los métodos de separación más comunes en la industria química, y el caso del etanol-agua es especialmente relevante debido a sus aplicaciones industriales en la producción de biocombustibles y en la industria farmacéutica. Para la simulación, se partió de una alimentación con un flujo molar de 100 kmol/h, con una composición equimolar de etanol y agua. Utilizando el método de McCabe-Thiele, se elaboró un diagrama de equilibrio que representa la relación entre las composiciones de vapor y líquido en cada fase del proceso. A partir de este análisis, se calcularon las etapas teóricas necesarias y la ubicación óptima del plato de alimentación para maximizar la eficiencia de la columna de destilación. El modelo permitió obtener un destilado con un flujo molar de 75 kmol/h y un residuo de 25 kmol/h. Los resultados indicaron que se requieren 10.6 etapas teóricas para alcanzar la pureza deseada del 90% de etanol en el destilado. La simulación también destacó la importancia de las primeras etapas en

el proceso de separación, donde se observa la mayor diferencia en la composición entre las fases vapor y líquido. Este estudio demuestra la viabilidad de utilizar Excel como una herramienta accesible para la simulación de procesos de destilación, especialmente en contextos educativos y de investigación preliminar. Asimismo, se destaca la efectividad del método de McCabe-Thiele en el diseño y análisis de columnas de destilación, ofreciendo resultados que se alinean con los principios teóricos y la práctica industrial.

PALABRAS-CLAVE: Etanol, destilación binaria, McCabe-Thiele, diagrama de equilibrio.

APPLICATION OF THE MCCABE-THIELE METHOD USING MATHEMATICAL MODELING IN EXCEL TO DETERMINE THE THEORETICAL STAGES OF A BINARY DISTILLATION

ABSTRACT: This study focuses on the simulation of a binary distillation process of ethanol and water using a model developed in Excel, with the objective of obtaining ethanol with a purity of 90%. Distillation is widely recognized as one of the most common separation methods in the chemical industry and the case of ethanol-water is especially relevant due to its industrial applications in the production of biofuels and in the pharmaceutical industry. For the simulation, we started with a feed with a molar flow of 100 kmol/h, with an equimolar composition of ethanol and water. Using the McCabe-Thiele method, an equilibrium diagram was created that represents the relationship between the vapor and liquid compositions in each phase of the process. From this analysis, the necessary theoretical stages and the optimal location of the feed plate were calculated to maximize the efficiency of the distillation column. The model allowed obtaining a distillate with a molar flow of 75 kmol/h and a residue of 25 kmol/h. The results indicated that 10.6 theoretical stages are required to achieve the desired purity of 90% ethanol in the distillate. The simulation also highlighted the importance of the first stages in the separation process, where the greatest difference in composition is observed between the vapor and liquid phases. This study demonstrates the feasibility of using Excel as an accessible tool for simulation of distillation processes, especially in educational and preliminary research contexts. Likewise, the effectiveness of the McCabe-Thiele method in the design and analysis of distillation columns is highlighted, offering results that align with theoretical principles and industrial practice.

KEYWORDS: Ethanol, binary distillation, McCabe-Thiele, equilibrium diagram.

INTRODUCCIÓN

La destilación es un proceso de separación térmica que se basa en las diferencias en las volatilidades de los componentes en una mezcla líquida. Este método se ha utilizado extensamente en la industria química, petroquímica y de alimentos debido a su capacidad para separar y purificar compuestos con alta eficiencia (GHOULI; ARTZNER; MALFREY, 2016). En particular, la destilación binaria de etanol y agua es un proceso de gran relevancia en la producción de etanol, el cual es ampliamente utilizado como biocombustible, en la industria farmacéutica y en la producción de bebidas alcohólicas (YAN; EDGAR; BALDEA, 2019).

El diseño y la optimización de columnas de destilación constituyen tareas fundamentales en el campo de la ingeniería química, ya que estos procesos requieren un consumo considerable de energía y recursos materiales. El método de McCabe-Thiele, desarrollado en la década de 1920, es una herramienta gráfica que ha sido fundamental en la enseñanza y práctica del diseño de columnas de destilación (BARDERAS, 2010). Este método posibilita, mediante un enfoque simplificado, calcular el número de etapas teóricas requeridas para alcanzar la separación deseada entre dos componentes en una mezcla. (ZAPATA BENABITHE et al., 2020).

Aunque existen numerosos softwares comerciales diseñados para la simulación de procesos de destilación, como Aspen HYSYS y ChemCAD, la utilización de Excel para este propósito ofrece una alternativa accesible y versátil. Excel no solo facilita la implementación de modelos matemáticos y la visualización de datos, sino que también permite a los ingenieros y estudiantes realizar simulaciones preliminares sin la necesidad de un software especializado (HU et al., 2020).

Este estudio tiene como objetivo aplicar un modelo en Excel para simular el proceso de destilación binaria de etanol y agua, con el fin de producir etanol con una pureza del 90%. A través de esta simulación, se busca demostrar la eficacia del método de McCabe-Thiele y resaltar la utilidad de Excel como una herramienta de modelación accesible y eficaz en el contexto de la ingeniería química (POTHOCZKI; PUSZTAI; BAKÓ, 2018).

METODOLOGÍA

Descripción del Sistema

El sistema estudiado consiste en una columna de destilación binaria que separa una mezcla de etanol y agua. Este proceso se realiza a presión atmosférica, y la alimentación de la columna se establece en un flujo molar de 100 kmol/h, con una composición equimolar de etanol y agua (OCON; TOJO, 1980). El diseño del sistema se fundamenta en los principios esenciales de la destilación, utilizando las diferencias en las volatilidades de los componentes para lograr la separación deseada. (KONG; MARAVELIAS, 2019).

Balance General y Específico de Materia

El balance general de materia aplicado al proceso de destilación se expresa como:

$$F = D + R \quad (1)$$

F , D , R es el flujo molar de alimentación, destilado y residuo respectivamente.

El balance de materia para el componente más volátil, en este caso el etanol, se formula de la siguiente manera:

$$F x_F = Dx_D + Rx_R \quad (2)$$

x_F , x_D y x_R son las fracciones molares de etanol en la alimentación, el destilado y el residuo, respectivamente [2].

Reflujo Mínimo y Reflujo de Operación

El reflujo mínimo es la relación entre la cantidad de líquido que se recircula a la columna y la cantidad de vapor que se condensa, requerida para alcanzar la separación deseada con un número infinito de platos teóricos. Este parámetro es fundamental para definir los límites de operación de la columna de destilación (A. UDUGAMA et al., 2018). El reflujo de operación, por otro lado, se refiere a la relación de reflujo real utilizada en la columna, situándose entre los extremos del reflujo total (mínimo número de platos) y el reflujo mínimo (número infinito de platos) (YANG et al., 2019). La ecuación utilizada para calcular el reflujo de operación es:

$$R_{op} = nR_{min} \quad (3)$$

donde n es un factor de ajuste que depende de las condiciones operativas específicas de la columna (ASPRION, 2020).

LÍNEAS DE OPERACIÓN

En el método de McCabe-Thiele, se consideran dos líneas de operación principales: la línea de enriquecimiento (LOE) y la línea de agotamiento (LOA). La línea de enriquecimiento corresponde a la sección de la columna ubicada entre el punto de alimentación y el plato superior, mientras que la línea de agotamiento se encuentra entre el punto de alimentación y el plato inferior (ALVES et al., 2020).

La ecuación de la línea de operación para la sección de enriquecimiento se expresa como:

$$y_{n+1} = \frac{L_n}{V_{n+1}} x_n + \frac{Dx_D}{V_{n+1}} \quad (4)$$

donde:

- y_{n+1} es la fracción molar de etanol en el vapor que sube,
- x_n es la fracción molar de etanol en el líquido que baja,
- L_n y V_{n+1} son los flujos molares de líquido y vapor en las respectivas etapas.

El balance de componentes o línea de operación en la sección de enriquecimiento se formula como:

$$y_{n+1} = \frac{R}{R+1}x_n + \frac{X_D}{R+1} \quad (5)$$

Esta ecuación es fundamental para definir el comportamiento de la mezcla dentro de la columna y para determinar el número de etapas necesarias para la separación (KUMAR; GHOSH; PAL, 2019).

Determinación de las Etapas Teóricas

Las etapas teóricas se determina empleando el método gráfico de McCabe-Thiele, que implica trazar escalones entre la línea de operación y la curva de equilibrio. Estos escalones representan las etapas de contacto entre las fases líquida y vapor dentro de la columna. (SHANG et al., 2019).

Ubicación del Plato de Alimentación

La ubicación del plato de alimentación se determina en el diagrama de McCabe-Thiele mediante la intersección de la línea de operación de enriquecimiento con la línea de alimentación (SEEDAT; KAUCHALI; PATEL, 2021). Este punto de corte define la posición óptima para introducir la alimentación en la columna, lo que maximiza la eficiencia del proceso (LIU et al., 2021).

Condición Térmica de la Alimentación

La condición térmica de la alimentación, representada por el parámetro q , es fundamental para determinar la pendiente de la línea de alimentación en el diagrama de McCabe-Thiele (KIRSCHNER et al., 2021). El parámetro q se define como la fracción molar de líquido saturado formado por mol de material alimentado, y su valor varía según la condición de la alimentación, como se muestra en la siguiente Tabla.

Condiciones de alimentación	Medición de la condición térmica "q"
Líquido subenfriado	$q > 1$
Líquido saturado	$q = 1$
Parcialmente vaporizada	$1 > q > 0$
Vapor saturado	$q = 0$
Vapor sobrecalentado	$q < 0$

Tabla 1 Condiciones de alimentación

Equilíbrio Líquido-Vapor

El equilibrio líquido-vapor es esencial para el diseño y análisis de procesos de destilación. En el caso del sistema binario etanol-agua, los datos de equilibrio a 1 atm de presión se utilizan para trazar la curva de equilibrio en el diagrama de McCabe-Thiele (LEJEUNE; RABILLER-BAUDRY; RENOARD, 2018), lo que permite determinar el número de etapas teóricas y la posición óptima del plato de alimentación (MARCILLA, 1998).

T °C	95.5	89	86.7	85.3	82.7	81.5	79.8	79.3	78.41	78.15
x	0.019	0.072	0.096	0.124	0.23	0.32	0.50	0.57	0.74	0.894
y	0.17	0.389	0.427	0.47	0.54	0.58	0.65	0.68	0.78	0.894

Tabla 2 Sistema a equilibrio de etanol-agua a 1atm

Implementación en Excel y Validación del Modelo

El modelo matemático y las ecuaciones presentadas fueron implementados en Excel, utilizando funciones de iteración y gráficos para simular el proceso de destilación (FOUST; WENZEL; CLUMP, 1984). La simulación permitió obtener el número de etapas teóricas, el reflujo mínimo, y la ubicación óptima del plato de alimentación. La validación del modelo se realizó comparando los resultados obtenidos con datos experimentales y simulaciones en software especializado, demostrando la precisión y utilidad del enfoque utilizado (KONG; MARAVELIAS, 2019).

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Se empleará la herramienta Excel para realizar una destilación de una mezcla de etanol y agua, iniciando con una composición de 70% etanol y 30% agua a una presión de 1 atm. La mezcla de alimentación, en estado líquido saturado ($q=1$), ingresará a la columna, y el objetivo es obtener un destilado con una fracción de etanol del 90%. Se utilizará el método de McCabe-Thiele para calcular el número de etapas teóricas necesarias y el plato de alimentación (VEINTIMILLA, 2022).

Variáveis	Valores
$X_{F\text{etanol}}$	0.7
$X_{F\text{agua}}$	0.3
P (atm)	1
Líquido saturado (q)	1
$X_{D\text{etanol}}$	0.9

Tabla 3 Datos planteados

La Ilustración 1 presenta el diagrama de flujo para la destilación binaria con las condiciones especificadas en la Tabla 3. Debido a que la alimentación no se especificó en términos de flujo, se asumirá una tasa de alimentación de 100 kmol/h para los cálculos (CARRAVETTA et al., 2022).

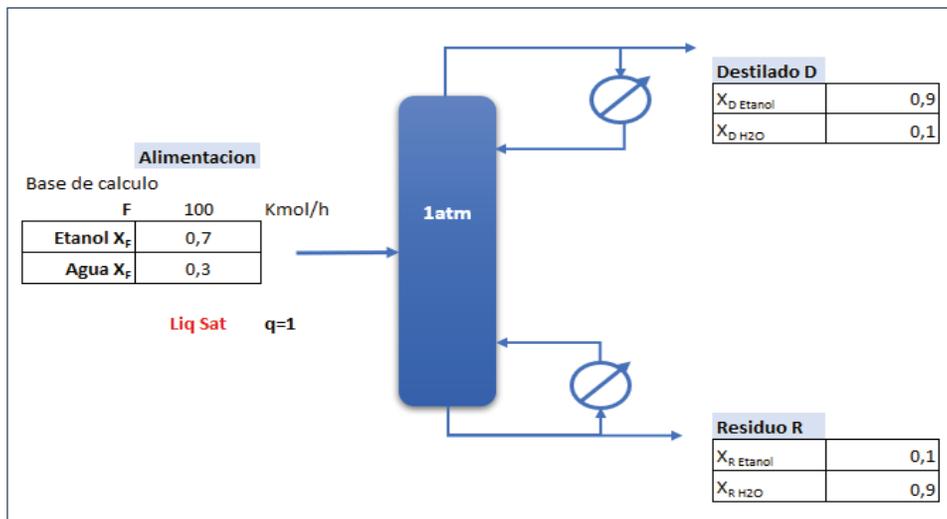


Gráfico 1 El diagrama de flujo

Los resultados obtenidos de la simulación en Excel mostraron que, para un flujo molar de alimentación de 100 kmol/h y utilizando el método de McCabe-Thiele, fue posible obtener un destilado con una pureza de etanol del 90%, correspondiente a un flujo de destilado de 75 kmol/h y un residuo de 25 kmol/h.

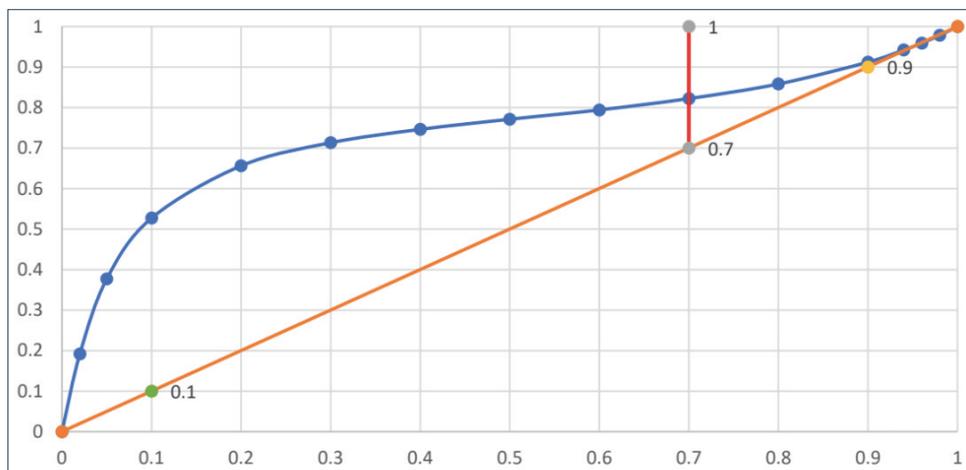


Gráfico 2 Sistema a equilibrio etanol-agua a 1 atm

En la Ilustración 3, se muestra el trazo de la línea desde x_D que cruce por un punto

que tope la curva de equilibrio y q, finalmente que intercepte en el eje de y, dando en b= 0.52 (VEINTIMILLA, 2022)

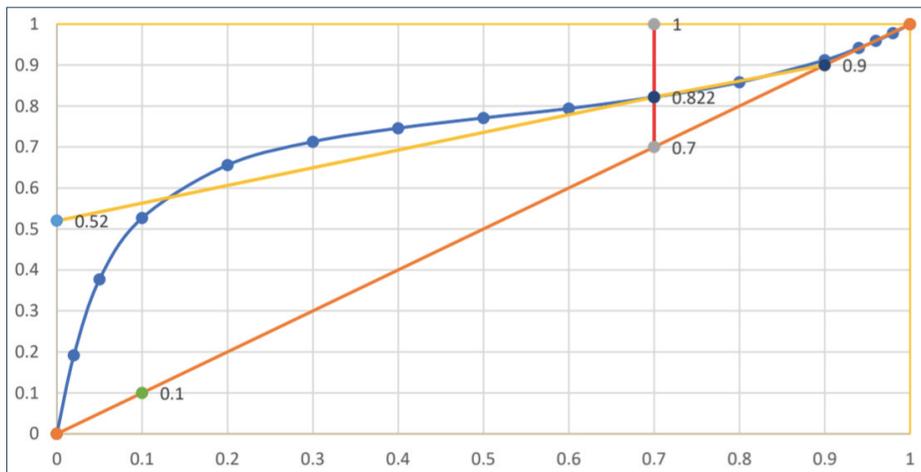


Gráfico 3 Diagrama de equilibrio etanol-agua a 1 atm

El cálculo del número teórico de etapas se efectúa a través de la línea de operación de la sección de enriquecimiento, lo que está relacionado con la composición vapor-líquido. En este caso, se utiliza la ecuación de la línea de enriquecimiento. Luego, al reemplazar los datos, se obtiene el valor del reflujo mínimo (R_{min}), que en este caso es $b=0.52$, el cual se obtiene en el eje y de la recta trazada (VEINTIMILLA, 2022).

Ecuación de línea de enriquecimiento

$$y = \frac{R}{R+1}x + \frac{\tilde{x}_D}{R+1}$$

La fórmula de la pendiente

$$y = m x + b$$

Sustituimos y la ecuación da:

$$b = \frac{x_D}{R_{min} + 1}$$

$$0.52 = \frac{0.9}{R_{min} + 1}$$

$$R_{min} = 0,7308$$

Calcular el reflujo de operación R_{op} y línea de rectificación.

$$R_{op} = n R_{min}$$

$$R_{op} = 1.5 (0.7308)$$

$$R_{op} = 1.0962$$

$$\frac{\frac{x_D}{R_{op} + 1}}{1.0962 + 1} = \mathbf{0.43}$$

Trazamos la nueva línea de rectificación en la gráfica, $y: 0.43$. En la ilustración 4 y se observa por el método gráfico, los resultados del número de etapas teóricas y plato de

alimentación.

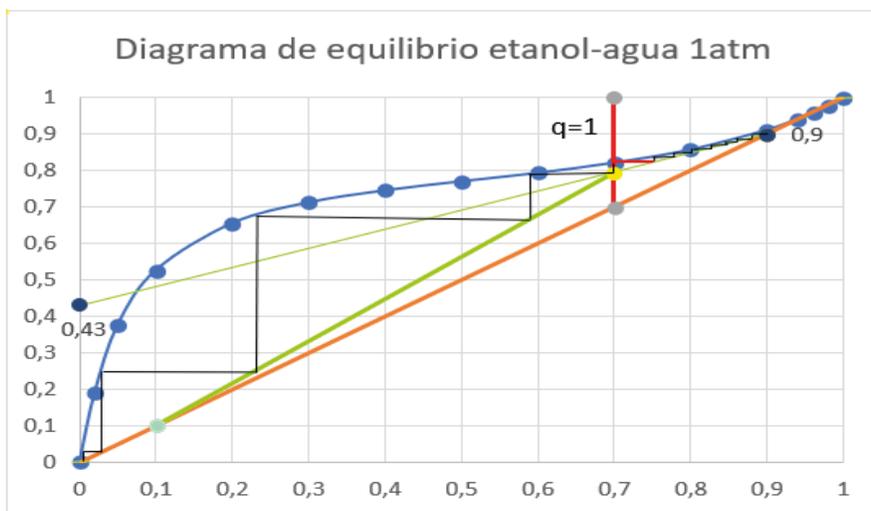


Gráfico 4 Numero de Etapas teóricas

El número de etapas teóricas calculado fue de 10,6, con un plato de alimentación situado en la octava etapa. Estos resultados son consistentes con los principios teóricos de la destilación y el método de McCabe-Thiele, confirmando que la modelación en Excel puede reproducir el comportamiento esperado del sistema etanol-agua bajo las condiciones establecidas.

El análisis del diagrama de equilibrio permitió identificar las composiciones de equilibrio líquido-vapor en cada etapa, observando que la mayor parte de la separación ocurre en las primeras etapas, donde la diferencia de composición entre el vapor y el líquido es más significativa. Este comportamiento es típico en sistemas de destilación binaria y subraya la importancia de un diseño adecuado de la columna para optimizar la separación.

CONCLUSIÓN

El estudio demostró que es posible utilizar Excel para simular un proceso de destilación binaria etanol-agua con un alto grado de precisión, empleando el método de McCabe-Thiele. Los resultados obtenidos no solo son consistentes con la teoría, sino que también subrayan la accesibilidad y la utilidad de Excel como herramienta alternativa para la modelación de procesos de destilación en entornos educativos o de investigación preliminar.

La capacidad de Excel para realizar cálculos iterativos y visualizar resultados lo convierte en una opción viable para quienes no tienen acceso a software de simulación especializado, proporcionando una base sólida para el diseño y análisis de procesos de separación en la industria química.

REFERENCIAS

ALVES, J. L. F. et al. Ethanol enrichment from an aqueous stream using an innovative multi-tube falling film distillation column equipped with a biphasic thermosiphon. **Process Safety and Environmental Protection**, v. 139, p. 69–75, jul. 2020.

ASPRION, N. Modeling, Simulation, and Optimization 4.0 for a Distillation Column. **Chemie Ingenieur Technik**, v. 92, n. 7, p. 879–889, 29 jul. 2020.

A. UDUGAMA, I. et al. Side draw control design for a high purity multi-component distillation column. **ISA Transactions**, v. 76, p. 167–177, maio 2018.

BARDERAS, V. A. **Destilación Por El Metodo de Mc Cabe - Thiele**. [s.l.: s.n.].

CARRAVETTA, V. et al. An atomistic explanation of the ethanol–water azeotrope. **Physical Chemistry Chemical Physics**, v. 24, n. 42, p. 26037–26045, 2022.

FOUST, A.; WENZEL, L.; CLUMP, C. **Principios de Operaciones Unitarias**. México : CECSA, 1984.

GHOUI, A.; ARTZNER, F.; MALFREYT, P. Physical Properties and Hydrogen-Bonding Network of Water–Ethanol Mixtures from Molecular Dynamics Simulations. **The Journal of Physical Chemistry B**, v. 120, n. 4, p. 793–802, 4 fev. 2016.

HU, Y. et al. Design and optimization of the efficient extractive distillation process for separating the binary azeotropic mixture methanol-acetone based on the quantum chemistry and conceptual design. **Separation and Purification Technology**, v. 242, p. 116829, jul. 2020.

KIRSCHNER, J. et al. The molecular structure of the surface of water–ethanol mixtures. **Physical Chemistry Chemical Physics**, v. 23, n. 19, p. 11568–11578, 2021.

KONG, L.; MARAVELIAS, C. T. From graphical to model-based distillation column design: A McCabe-Thiele-inspired mathematical programming approach. **AIChE Journal**, v. 65, n. 11, 7 nov. 2019.

KUMAR, R.; GHOSH, A. K.; PAL, P. Fermentative ethanol production from *Madhuca indica* flowers using immobilized yeast cells coupled with solar driven direct contact membrane distillation with commercial hydrophobic membranes. **Energy Conversion and Management**, v. 181, p. 593–607, fev. 2019.

LEJEUNE, A.; RABILLER-BAUDRY, M.; RENOUIARD, T. Design of membrane cascades according to the method of McCabe-Thiele: An organic solvent nanofiltration case study for olefin hydroformylation in toluene. **Separation and Purification Technology**, v. 195, p. 339–357, abr. 2018.

LIU, S. et al. [EMIM][DCA] as an entrainer for the extractive distillation of methanol-ethanol-water system. **Green Energy & Environment**, v. 6, n. 3, p. 363–370, jun. 2021.

MARCILLA, A. **Introducción a Las Operaciones de Separación. Cálculo Por Etapas de Equilibrio**. Espagráfica ed. España: Publicaciones Universidad de Alicante, 1998.

OCÓN, P.; TOJO, J. **Problemas de Ingeniería Química**. [s.l.] Aguilar, 1980.

POTHOCZKI, S.; PUSZTAI, L.; BAKÓ, I. Temperature dependent dynamics in water-ethanol liquid mixtures. **Journal of Molecular Liquids**, v. 271, p. 571–579, dez. 2018.

SEEDAT, N.; KAUCHALI, S.; PATEL, B. A graphical method for the preliminary design of ternary simple distillation columns at finite reflux. **South African Journal of Chemical Engineering**, v. 37, p. 99–109, jul. 2021.

SHANG, X. et al. Process analysis of extractive distillation for the separation of ethanol–water using deep eutectic solvent as entrainer. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 148, p. 298–311, ago. 2019.

VEINTIMILLA, K. **Determinación de las etapas teóricas y plato de alimentación mediante el método de mc cabe-thiele en la destilación binaria**. Machala : Universidad Técnica de Machala, 2022.

YANG, A. et al. Energy-efficient extractive pressure-swing distillation for separating binary minimum azeotropic mixture dimethyl carbonate and ethanol. **Separation and Purification Technology**, v. 229, p. 115817, dez. 2019.

YAN, L.; EDGAR, T. F.; BALDEA, M. Dynamic Process Intensification of Binary Distillation via Periodic Operation. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 58, n. 15, p. 5830–5837, 17 abr. 2019.

ZAPATA BENABITHE, Z. et al. Caso de estudio de la destilación etanol-agua en operación continua y discontinua y su simulación con ecuaciones cúbicas de estado y modelos de actividad. **Tecnológicas**, v. 23, n. 49, p. 223–249, 15 set. 2020.