

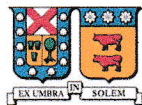
UNIVERSIDAD TECNICA FEDERICO SANTA MARIA
SEDE CONCEPCION – REY BALDUINO DE BÉLGICA

**COMPARACIÓN DEL MÉTODO GRÁFICO
McCabe-THIELE MEDIANTE SIMULACIÓN EN
CHEMSEP PARA UNA COLUMNA DE
DESTILACIÓN TERNARIA BENCENO-TOLUENO-
O-XILENO**

Trabajo de titulación para optar al título
de Ingeniería de ejecución en QUÍMICA
MENCIÓN CONTROL.

Alumna:

Joshefa Andrea Arriagada Torres



CONSTANCIA DE VALIDACIÓN Y CONFIDENCIALIDAD DE MONOGRAFÍA A REPOSITORIO ACADÉMICO

1.- IDENTIFICACIÓN DEL TRABAJO ACADÉMICO

Tipo de monografía (marcar una opción): ☒ Memoria o trabajo de título ☐ Tesis de Postgrado

Título del trabajo: Comparación del método gráfico McCabe-Thiele mediante simulación en chemsep para una columna de destilación ternaria benceno-tolueno- o-xileno

Nombre del candidato(a): JOSHEFA ANDREA ARRIAGADA TORRES

Carrera / Grado: Ingeniería de ejecución química mención control

Campus: Sede Concepción Departamento: Química y Medio Ambiente

2.- VALIDACIÓN DEL PROFESOR GUÍA/DIRECTOR DE TESIS

Yo, CRISTIAN MARCELO PEREIRA ABURTO, en mi calidad de profesor(a) guía/director(a) del trabajo académico mencionado anteriormente **DEJO CONSTANCIA** que:

- He revisado esta versión del documento y corresponde a la versión final aprobada del trabajo.
- El trabajo cumple con los requisitos académicos y de formato establecidos por la institución.

3.- EVALUACIÓN DE CONFIDENCIALIDAD POR PROPIEDAD INDUSTRIAL (marcar una opción)

☒ El trabajo **NO contiene** información que amerite confidencialidad y puede ser publicado de inmediato en repositorio con acceso abierto.

☐ El trabajo **CONTIENE** información con potenciales implicancias de propiedad industrial o intelectual y requiere un período de confidencialidad (**embargo**) por (marcar una opción):

☐ 6 meses ☐ 12 meses ☐ 2 años ☐ 3 años ☐ 5 años ☐ 10 años

Fundamentación de la necesidad de confidencialidad (obligatorio si se solicita embargo):

4.- FIRMAS

Profesor(a) guía o director(a) de memoria o tesis:

Fecha: 13-01-2026

Firma:

Estudiante o Candidato(a):

Fecha: 13-01-2026

Firma:

Este formulario debe ser insertado como página 2 de la memoria o tesis, completado y firmado por estudiante y profesor(a) antes de la entrega en portal PRISMA de Biblioteca USM.

RESUMEN

El presente trabajo de titulación tiene como objetivo comparar la aplicación del método gráfico de McCabe–Thiele mediante los resultados obtenidos en el simulador de procesos ChemSep, para el caso de una columna de destilación ternaria compuesta por Benceno, Tolueno y O-Xileno (BTX). La investigación se desarrollará bajo condiciones de presión atmosférica y considerando un comportamiento ideal de la mezcla, con el propósito de analizar la correlación entre los resultados teóricos y los obtenidos por simulación computacional. En primera instancia, se aplicará el método de McCabe–Thiele a separaciones binarias representativas dentro del sistema BTX, determinando el número de etapas teóricas.

Posteriormente, se simulará la columna de destilación en el simulador de procesos ChemSep, replicando las mismas condiciones de operación. Finalmente, se realizará una comparación entre ambos métodos, evaluando diferencias en pureza, número de etapas y eficiencia del proceso, con el fin de determinar la validez, precisión y aplicabilidad del método gráfico en sistemas multicomponentes. Este estudio busca aportar una visión integradora entre los métodos tradicionales de diseño y las herramientas de simulación moderna, fortaleciendo el análisis y comprensión de los procesos de destilación en la ingeniería química.

INDICE

INTRODUCCION 1

OBJETIVO GENERAL 2

OBJETIVOS ESPECIFICOS 2

ALCANCE 3

METODOLOGIA 4

CAPÍTULO 1: MÉTODO McCABE–THIELE 5

 1.1 FUNDAMENTOS DEL PROCESO DE DESTILACIÓN 6

 1.1.1 Importancia de la destilación en la industria química 6

 1.1.2 Tipos de destilación 7

 1.2 MÉTODO GRÁFICO DE McCABE–THIELE.....9

 1.2.1 Objetivo del método..... 9

 1.2.2 Supuestos del método de McCabe–Thiele:..... 9

 1.3 DESCRIPCIÓN DE LOS COMPONENTES DEL SISTEMA

 BTX 11

 1.3.1 Benceno (C_6H_6) 11

 1.3.2 Tolueno ($C_6H_5-CH_3$)..... 12

 1.3.3 o-Xileno ($C_6H_4(CH_3)_2$)..... 12

 1.4 Relación entre propiedades y su impacto en la destilación.....12

 1.5 DESARROLLO DEL METODO GRAFICO McCABE-THIELE

 PARA EL SISTEMA BTX 14

 1.5.1 Enfoque pseudobinario..... 14

 1.5.2 Composición de alimentación 15

 1.5.3 Caudal de alimentación 16

1.5.4	Condiciones de operación	17
1.5.5	Destilado y fondo	19
1.5.6	Equilibrio liquido-vapor	21
1.6	RESULTADOS OBTENIDOS MEDIANTE EL METODO GRAFICO DE McCABE-THIELE.....	22
1.6.2	Curva de alimentación (línea q)	24
1.6.3	Determinación de los puntos de intersección	26
1.6.4	Análisis e interpretación del número de platos teóricos obtenidos	28
CAPÍTULO 2: CHEMSEP		30
1.7	Resultados de la simulación en ChemSep.....	32
1.7.1	Selección de componentes:	32
1.7.2	Modelo termodinámico utilizado:.....	33
1.7.3	Definición de las condiciones de operación	34
1.7.4	Configuración de la columna de destilación.....	35
1.7.5	Resultados de la simulación.....	36
CAPITULO 3: McCABE-THIELE VS CHEMSEP.....		38
3.1	Comparación de las condiciones de operación	39
3.2	Comparación del número de etapas teóricas	40
3.3	Comparación de las composiciones de los productos	40
3.4	Comparación de resultados	41
3.5	Evaluación de la aplicabilidad del método de McCabe–Thiele	42
DISCUSIONES		44
BIBLIOGRAFIA.....		44

INDICE DE FIGURAS

Figura 1 Curva de equilibrio liquido-vapor	23
Figura 2 Curva de alimentación	24
Figura 3 Puntos de intersección.....	27
Figura 4 Platos teóricos	28
Figura 5 Selección de componente en simulador ChemSep.....	32
Figura 6 Modelo termodinámico en simulador ChemSep	33
Figura 7 Condiciones de operación en simulador ChemSep	34
Figura 8 Columna de destilación en el simulador Chemsep.....	35
Figura 9 Resultados de composición de la columna.....	36

INDICE DE TABLAS

Tabla 1 Relación entre propiedades BTX 13

Tabla 2 Comparación de resultados 41

INTRODUCCION

La destilación constituye uno de los procesos más utilizados en la industria química para la separación de mezclas líquidas, debido a su eficiencia y versatilidad en la obtención de productos de alta pureza. Entre las herramientas empleadas para el diseño y análisis de columnas de destilación, el método gráfico de McCabe-Thiele destaca por su sencillez conceptual y su capacidad para representar visualmente las etapas teóricas necesarias para alcanzar una separación deseada en sistemas binarios. Sin embargo, su aplicación se vuelve más compleja cuando se aborda el caso de mezclas ternarias, donde las interacciones entre componentes generan comportamientos no ideales y la aparición de fenómenos como azeótropos o desviaciones de la ley de Raoult.

En este contexto, la presente investigación tiene como objetivo comparar el método gráfico de McCabe-Thiele mediante simulación en el simulador Chemsep, utilizando como sistema de estudio una mezcla ternaria de Benceno, Tolueno y O-Xileno (BTX). Estos compuestos aromáticos son ampliamente utilizados en la industria petroquímica y presentan características termodinámicas que los convierten en un modelo representativo para el estudio de procesos de destilación fraccionada.

La simulación en Chemsep permitirá comparar los resultados teóricos obtenidos mediante el método gráfico con los valores calculados por el programa, evaluando la concordancia entre ambos y determinando las limitaciones y alcances del método de McCabe-Thiele cuando se aplica a sistemas de más de dos componentes. De este modo, el trabajo busca no solo reforzar la comprensión del equilibrio líquido-vapor y del diseño de columnas de destilación, sino también validar la utilidad de herramientas de simulación computacional en el ámbito académico e industrial.

OBJETIVO GENERAL

Comparar la aplicación del método gráfico de McCabe–Thiele mediante los resultados obtenidos en el simulador Chemsep para una columna de destilación ternaria compuesta por Benceno, Tolueno y O-Xileno.

OBJETIVOS ESPECIFICOS

1. Aplicar el método gráfico de McCabe–Thiele al sistema ternario Benceno–Tolueno– o-Xileno.
2. Simular la columna de destilación en el simulador de procesos ChemSep bajo las mismas condiciones del análisis teórico.
3. Comparar y evaluar los resultados obtenidos por ambos métodos para determinar la precisión y aplicabilidad del método de McCabe–Thiele en sistemas multicomponentes.

ALCANCE

El estudio se centra en una columna de destilación ternaria compuesta por Benceno, Tolueno y o-Xileno (BTX). Se busca establecer el grado de concordancia entre las metodologías y analizar la viabilidad del método de McCabe–Thiele como herramienta académica y profesional en el diseño preliminar de columnas de destilación multicomponentes.

METODOLOGIA

La metodología se basará en la comparación entre el método gráfico de McCabe–Thiele y la simulación en el simulador de procesos Chemsep. Primero se realizará una revisión bibliográfica sobre destilación y equilibrio líquido–vapor. Luego, se aplicará el método de McCabe–Thiele a la mezcla ternaria Benceno–Tolueno–o-Xileno para estimar el número de etapas. Posteriormente, se simulará la columna de destilación en ChemSep bajo las mismas condiciones. Finalmente, se compararán los resultados obtenidos para evaluar la precisión y aplicabilidad del método gráfico en sistemas multicomponentes.

CAPÍTULO 1: MÉTODO McCABE–THIELE

1.1 FUNDAMENTOS DEL PROCESO DE DESTILACIÓN

La destilación es una de las operaciones unitarias más empleadas en la industria química para la separación de mezclas líquidas. Este proceso se basa en la diferencia de volatilidad entre los componentes, lo cual permite que, al suministrar calor a la mezcla, los compuestos más volátiles se enriquezcan en la fase vapor mientras que los menos volátiles permanecen mayoritariamente en la fase líquida. El vapor generado se conduce hacia un sistema de condensación, donde se obtiene un destilado enriquecido en los componentes ligeros, mientras que en la base del equipo se concentra el residuo o fondo.

Desde un punto de vista termodinámico, la destilación depende directamente del equilibrio líquido–vapor (ELV), el cual relaciona la composición del vapor y del líquido en equilibrio a una temperatura y presión definidas. El conocimiento de esta relación es esencial para la estimación del número de etapas, el cálculo de la relación de reflujo y el diseño preliminar de columnas de destilación.

1.1.1 Importancia de la destilación en la industria química

La destilación posee un rol fundamental en múltiples sectores industriales debido a su flexibilidad, eficiencia y aplicabilidad en una amplia variedad de mezclas. En la industria petroquímica, por ejemplo, es indispensable para la separación y purificación de hidrocarburos aromáticos como el sistema BTX (Benceno, Tolueno y o-Xileno), el cual constituye materias primas esenciales en la producción de solventes, resinas, polímeros y otros productos de alto valor agregado.

Asimismo, la destilación presenta ventajas operacionales relevantes: permite una alta capacidad de procesamiento, admite variados grados de automatización y puede adaptarse tanto a procesos continuos como discontinuos. Estas características la han consolidado como una operación clave para la producción de sustancias químicas con niveles de pureza definidos, facilitando el cumplimiento de requerimientos normativos y de calidad en diversas industrias.

Por lo anterior, comprender los fundamentos de la destilación es indispensable para el estudio y aplicación de métodos de diseño, como el método gráfico de McCabe–Thiele, especialmente en sistemas multicomponentes de relevancia industrial como el BTX.

1.1.2 Tipos de destilación

Existen diversos tipos de destilación, seleccionados según las características de la mezcla, los puntos de ebullición de los componentes y las condiciones operacionales del proceso. Entre los más utilizados se encuentran:

1.1.2.1 Destilación simple

Consiste en la vaporización parcial de la mezcla y la posterior condensación del vapor enriquecido en los componentes más volátiles. Se utiliza principalmente cuando los puntos de ebullición presentan diferencias significativas. Su aplicación es más frecuente en laboratorio que a escala industrial.

1.1.2.2 Destilación fraccionada

Es la técnica más utilizada en la industria y constituye la base para el diseño de columnas de destilación. Se caracteriza por la presencia de una columna equipada con platos o material de empaque, donde se establecen múltiples etapas de equilibrio líquido–vapor. Este método es especialmente adecuado para mezclas cuyos componentes presentan puntos de ebullición cercanos, como el sistema BTX. Además, el método de McCabe–Thiele se basa en esta configuración.

1.1.2.3 Destilación al vacío

Opera a presiones inferiores a la atmosférica, permitiendo disminuir los puntos de ebullición de los componentes. Se emplea cuando las sustancias presentan sensibilidades térmicas o cuando sus puntos de ebullición son demasiado elevados para operar a presión atmosférica.

1.1.2.4 Destilación azeotrópica

Se utiliza en mezclas que forman azeótropos, cuyo vapor presenta la misma composición que el líquido en ebullición. Para romper este comportamiento se introduce un agente entrainer que modifique la volatilidad relativa.

1.1.2.5 Destilación extractiva

Incorpora un solvente que altera selectivamente las interacciones moleculares del sistema, facilitando la separación de componentes con volatilidades muy similares.

1.1.2.6 Destilación por arrastre de vapor

Permite la separación de compuestos sensibles al calor al disminuir la temperatura de ebullición mediante la inyección de vapor directo.

1.1.2.7 Destilación reactiva

Combina simultáneamente reacción química y separación por destilación dentro de la misma columna. Aumenta la conversión y selectividad en procesos donde las reacciones y la separación pueden integrarse.

1.2 MÉTODO GRÁFICO DE McCABE–THIELE

El método gráfico de McCabe–Thiele es una de las herramientas clásicas más utilizadas para el diseño preliminar de columnas de destilación binaria. Desarrollado en 1925 por McCabe y Thiele, este método permite estimar visualmente el número de etapas teóricas necesarias para lograr una separación determinada, así como evaluar la influencia de la relación de reflujo, la ubicación de la alimentación y las composiciones de los productos.

Su simplicidad radica en el uso del diagrama de equilibrio x – y , en el cual se representan las curvas de operación y la curva de equilibrio líquido–vapor. A partir de ello se construyen "escalones" que representan sucesivas etapas de equilibrio dentro de la columna.

1.2.1 Objetivo del método

El método tiene como objetivo fundamental proporcionar una herramienta gráfica que permita:

- Determinar el número de etapas teóricas de la columna.
- Estimar la relación de reflujo mínima y evaluar su efecto sobre el diseño.
- Definir la posible ubicación de la alimentación.
- Visualizar las diferencias entre las secciones de rectificación y agotamiento.
- Realizar un diseño preliminar rápido sin necesidad de cálculos complejos o software de simulación.

A pesar de su sencillez, el método sigue siendo ampliamente utilizado tanto en la industria como en la enseñanza de la ingeniería química debido a su carácter intuitivo y a su valor como punto de partida para análisis más detallados.

1.2.2 Supuestos del método de McCabe–Thiele:

El método se desarrolla bajo una serie de supuestos fundamentales que permiten representar el proceso en un diagrama simple de dos dimensiones. Entre los principales supuestos se incluyen:

1.2.2.1 Sistema binario:

Se asume que la mezcla está compuesta únicamente por dos componentes cuyos comportamientos pueden representarse en un diagrama de equilibrio líquido–vapor x – y .

1.2.2.2 Mezcla ideal y volatilidad relativa constante:

El método presupone que la mezcla se comporta idealmente y que la volatilidad relativa entre los componentes permanece aproximadamente constante en el rango de operación.

1.2.2.3 Flujo molar constante (C.M.O., Constant Molar Overflow):

Se asume que:

- El flujo de vapor es constante en ambas secciones de la columna.
- El flujo líquido también es constante.

Este supuesto implica que los cambios de entalpía por evaporación y condensación se compensan entre sí.

1.2.2.4 Equilibrio líquido–vapor en cada etapa:

Cada plato o etapa se modela como una etapa teórica en la que el vapor y el líquido alcanzan equilibrio termodinámico antes de abandonar la etapa.

1.2.2.5 Columna adiabática:

No existen pérdidas ni ganancias de calor hacia el entorno.

1.2.2.6 Operación continua y estacionaria:

Todas las condiciones permanecen constantes en el tiempo durante la operación.

Estos supuestos permiten la representación gráfica mediante líneas rectas para las secciones de enriquecimiento y agotamiento, simplificando significativamente el análisis.

1.3 **DESCRIPCIÓN DE LOS COMPONENTES DEL SISTEMA BTX**

El sistema BTX está compuesto por tres hidrocarburos aromáticos: benceno, tolueno y o-xileno, los cuales pertenecen a una misma familia química, pero presentan diferencias significativas en su volatilidad, masa molar y punto de ebullición. Estas características los convierten en un caso de estudio relevante para el análisis de procesos de separación mediante destilación. A continuación, se presentan las principales propiedades físicas y características de cada componente utilizadas para el desarrollo del presente trabajo de titulación.

1.3.1 Benceno (C₆H₆)

El benceno es un compuesto aromático monocíclico altamente volátil, incoloro y con un característico olor dulce. Su estructura molecular presenta una nube de electrones deslocalizados sobre el anillo aromático, lo que le confiere una elevada estabilidad química. Industrialmente, es utilizado como materia prima en la síntesis de polímeros, resinas, detergentes y otros compuestos orgánicos de alto valor agregado

Desde el punto de vista termodinámico, el benceno posee el menor punto de ebullición del sistema BTX, lo cual lo convierte en el componente más volátil y, por tanto, en la primera fracción que asciende en el proceso de destilación.

1.3.2 Tolueno ($C_6H_5-CH_3$)

El tolueno es un derivado metilado del benceno que presenta un comportamiento químico similar, pero con una volatilidad menor debido al aumento de masa molecular. Se caracteriza por ser un líquido claro, inflamable y de olor dulce. Es ampliamente utilizado como solvente orgánico en pinturas, adhesivos y productos químicos, además de ser un intermediario fundamental en diversas síntesis industriales.

Comparado con el benceno, el tolueno presenta un mayor punto de ebullición (aproximadamente $110\text{ }^{\circ}\text{C}$), ubicándose como componente intermedio en la separación del sistema BTX.

1.3.3 o-Xileno ($C_6H_4(CH_3)_2$)

El o-xileno es un hidrocarburo aromático dimetilado que presenta la mayor masa molar y el punto de ebullición más elevado dentro del sistema BTX, alcanzando aproximadamente $144\text{ }^{\circ}\text{C}$. Su menor volatilidad lo convierte en el componente más pesado de la mezcla. Es empleado principalmente en la producción de anhídrido ftálico, así como en la fabricación de plastificantes y resinas.

Desde la perspectiva del análisis de equilibrio líquido-vapor, su baja presión de vapor dificulta su separación respecto al tolueno en condiciones convencionales, razón por la cual se convierte en un componente crítico al evaluar el diseño de columnas de destilación.

1.4 Relación entre propiedades y su impacto en la destilación

Las propiedades físico-químicas de los componentes que conforman el sistema BTX (benceno, tolueno y xilenos) desempeñan un rol fundamental en el comportamiento del proceso de destilación, ya que determinan la facilidad de separación y la eficiencia operativa de la columna. Parámetros como el punto de ebullición, la presión de vapor y la volatilidad relativa influyen directamente en la distribución de los componentes entre las fases líquida y vapor, así como en el

número de etapas teóricas requeridas para alcanzar las especificaciones de producto.

En este contexto, la Tabla 1 presenta una relación comparativa entre las principales propiedades físico-químicas de los componentes del sistema BTX y su impacto sobre el proceso de destilación. Esta información permite comprender el fundamento termodinámico de la separación analizada y respalda tanto el diseño teórico mediante el método de McCabe–Thiele como los resultados obtenidos a través de la simulación rigurosa en ChemSep.

Tabla 1
Relación entre propiedades BTX

Propiedad	Benceno	Tolueno	Xileno
Masa molar	78,11 g/mol	92,14 g/mol	106,17 g/mol
Punto de ebullición	80,81°C	110,6°C	144,4°C
Punto de fusión	5,5°C	−95°C	−25,2°C
Densidad (20°C)	0,876 g/cm³	0,867 g/cm³	0,880g/cm³
Presión de vapor (25°C)	95 mmHg	28 mmHg	6–7 mmHg
Constante de antoine (10-200°C)	A=6,90565 B=1211.033 C=220.79	A=6,95464 B=1344,8 C=219,48	A=6,99240 B=6,99240 C=216,00

El orden creciente de puntos de ebullición:

$$\text{Benceno (80 °C)} < \text{Tolueno (111 °C)} < \text{o-Xileno (144 °C)}$$

Determina la facilidad relativa de separación del sistema mediante destilación. El benceno, al ser el más volátil, se extrae preferentemente en la parte superior de la columna, mientras que el o-xileno, con menor volatilidad, se concentra en el fondo.

1.5 DESARROLLO DEL METODO GRAFICO McCABE-THIELE PARA EL SISTEMA BTX

El sistema real estudiado en esta columna de destilación está constituido por una mezcla ternaria formada por Benceno (C_6H_6), Tolueno (C_7H_8) y o-Xileno (C_8H_{10}). Sin embargo, para efectos de la aplicación del método gráfico de McCabe–Thiele, se requiere trabajar con sistemas binarios o pseudobinarios, debido a que el método está construido sobre la base del equilibrio líquido–vapor para dos componentes. Por esta razón, el sistema ternario original se simplifica a un sistema pseudobinario considerando únicamente dos especies claves para la separación: Benceno y Tolueno, mientras que el Xileno se clasifica como componente pesado no clave.

Esta clasificación se fundamenta en el análisis del comportamiento volátil de cada compuesto dentro de la mezcla. El Benceno posee el punto de ebullición más bajo del sistema ($80.1\text{ }^{\circ}\text{C}$ a 1 atm), lo que lo convierte en el componente más volátil y, por tanto, en el clave liviano del proceso. En contraste, el Tolueno presenta un punto de ebullición intermedio ($110.6\text{ }^{\circ}\text{C}$ a 1 atm), por lo que actúa como clave pesado. Finalmente, el o-Xileno, con un punto de ebullición significativamente más elevado ($144.4\text{ }^{\circ}\text{C}$ a 1 atm), su volatilidad es muy baja respecto a los otros componentes y, en consecuencia, su presencia en la corriente de destilado resulta despreciable.

1.5.1 Enfoque pseudobinario

La reducción del sistema ternario a un pseudobinario se realiza bajo los siguientes criterios:

1.5.1.1 Dominio del equilibrio LK–HK:

Se asume que el equilibrio de fases relevante para el diseño corresponde principalmente a la interacción entre el componente clave liviano (Benceno) y el componente clave pesado (Tolueno). Ambos componentes definen la dificultad de separación y son los que controlan el número de etapas teóricas requeridas.

1.5.1.2 Efecto despreciable en el tope:

El o-Xileno, debido a su muy baja volatilidad relativa frente al Benceno y al Tolueno, se acumula casi completamente en la sección inferior de la columna. Por lo tanto, su contribución al equilibrio vapor-líquido en la parte superior es mínima y puede despreciarse sin introducir errores significativos en el cálculo gráfico.

1.5.1.3 Comportamiento del componente pesado no clave:

Aunque el o-Xileno no participa directamente en el equilibrio binario utilizado para construir el diagrama de McCabe–Thiele, se reconoce que sí influye en el balance global del sistema, contribuyendo a aumentar el flujo de líquido en el fondo y modificando ligeramente las temperaturas de operación en la columna. Sin embargo, para fines del método gráfico, su presencia se incorpora indirectamente a través de los balances globales de masa, sin necesidad de incluirlo en el equilibrio termodinámico.

1.5.2 Composición de alimentación

La caracterización de la composición de la corriente de alimentación constituye un aspecto fundamental en el diseño preliminar de una columna de destilación, ya que determina la dificultad del proceso de separación, la ubicación óptima del plato de alimentación y la configuración de las líneas operacionales dentro del método gráfico de McCabe–Thiele. En el presente estudio, se considera que la mezcla a separar corresponde al sistema ternario Benceno–Tolueno–o-Xileno, característico de corrientes aromáticas provenientes de procesos petroquímicos y de reformado catalítico.

Para efectos del diseño gráfico, se adopta una composición representativa del sistema BTX, seleccionada de manera que permita una separación industrialmente realizable. La corriente de alimentación se define con una fracción molar inicial de Benceno (LK): 0,50, Tolueno (HK): 0,50.

Esta relación de composición (50 % Benceno y 50 % Tolueno) es coherente con mezclas aromáticas típicas y ofrece un equilibrio adecuado entre facilidad de separación y representatividad del sistema real. Desde el punto de vista del diseño, esta alimentación presenta una concentración moderada del componente liviano clave, lo que implica que la columna debe operar con un número razonable de etapas teóricas para alcanzar la pureza deseada en el destilado.

1.5.3 Caudal de alimentación

El caudal de alimentación es un parámetro fundamental dentro del diseño y análisis de una columna de destilación, ya que determina la magnitud de los flujos internos de vapor y de líquido, influye en las cargas térmicas requeridas en el condensador y el rehervidor, y condiciona la capacidad operativa total de la unidad. Además, el caudal de alimentación afecta directamente el dimensionamiento de equipos asociados, como bandejas, empaques, intercambiadores de calor y bombas de recirculación. Para el presente estudio, se establece un caudal total de alimentación de:

- $F = 100 \text{ Kmol/h}$

Este valor ha sido seleccionado con el propósito de representar una operación estándar a escala piloto o semiindustrial, lo cual permite aplicar el método de McCabe–Thiele con suficiente relevancia práctica, garantizando al mismo tiempo la simplicidad computacional requerida para un análisis gráfico.

1.5.4 Condiciones de operación

La definición de las condiciones de operación constituye un aspecto fundamental en el análisis y aplicación del método gráfico de McCabe–Thiele, ya que determina el comportamiento termodinámico del sistema y la posición de las curvas de equilibrio líquido-vapor. Para este estudio, se establecen parámetros de operación representativos para una columna de destilación que procesa mezclas aromáticas livianas, permitiendo una descripción adecuada de los fenómenos físicos involucrados.

1.5.4.1 Presión de operación de la columna

La columna de destilación se considera operando a presión atmosférica ($P = 1 \text{ atm}$). Esta condición responde a dos criterios principales:

- **Termodinámico:**

A presiones cercanas a 1 atm, las mezclas aromáticas como benceno, tolueno y o-xileno presentan volatilidades relativas adecuadas para el proceso de separación. Operar a mayor presión disminuiría la volatilidad del benceno respecto del tolueno, generando una separación menos eficiente y aumentando el número mínimo de etapas.

- Operacional e industrial:

Las columnas de destilación atmosféricas son comunes para sistemas aromáticos livianos debido a menores costos de construcción, menor exigencia en el diseño mecánico por presión y evitar descomposición térmica o reacciones secundarias a altas temperaturas.

1.5.4.2 Temperatura de referencia para los cálculos de equilibrio:

Para la aplicación del método gráfico de McCabe–Thiele se seleccionó una temperatura de referencia de 90 °C, con el propósito de representar adecuadamente el comportamiento promedio del sistema Benceno–Tolueno bajo condiciones cercanas a la operación real. Aunque en una columna industrial existe un gradiente térmico entre las diferentes etapas, el uso de una temperatura única permite obtener una aproximación válida del equilibrio líquido-vapor y facilita el desarrollo de los cálculos.

La elección de esta temperatura favorece el uso directo de las ecuaciones de Antoine, a partir de las cuales se determinan las presiones de vapor de los componentes claves. Estos valores son necesarios para la construcción de la curva de equilibrio, la estimación de la volatilidad relativa (α) y la formulación de las líneas de operación del método gráfico.

Asimismo, la temperatura seleccionada resulta coherente con los puntos de ebullición de los componentes: el benceno hierve a 80,1 °C y el tolueno a 110,6 °C. De este modo, 90 °C constituye un valor intermedio adecuado para representar la zona de enriquecimiento donde predomina la separación entre el componente liviano (benceno) y el componente pesado (tolueno).

Bajo estas condiciones, la volatilidad relativa del sistema es suficientemente elevada para permitir una separación eficiente, reduciendo el número de etapas teóricas y manteniendo el diseño dentro de los parámetros típicos para columnas que procesan mezclas aromáticas.

1.5.5 Destilado y fondo

Las especificaciones de pureza del destilado y del fondo constituyen un elemento fundamental en el diseño y análisis de una columna de destilación, ya que determinan directamente la dificultad de separación, el número de etapas teóricas requeridas y las condiciones de operación asociadas. Para este estudio, y considerando el modelo pseudobinario adoptado previamente, se establecen las siguientes composiciones objetivo para los productos de la columna:

Destilado (Fracción molar de benceno LK): 0,90

Fondo (Fracción molar del benceno KH): 0,30

El valor del destilado indica que el 90 % molar del destilado corresponde a benceno, lo que refleja un alto grado de enriquecimiento del componente más volátil. Esta especificación es representativa de procesos industriales donde el objetivo principal es la recuperación eficiente de aromáticos livianos con alta pureza, y permite evaluar la capacidad de la columna para concentrar el benceno en la sección de enriquecimiento.

El valor del fondo implica que el benceno no es completamente eliminado del fondo, lo cual es coherente con un diseño preliminar en el que se prioriza la recuperación del componente liviano en el destilado por sobre una purificación extrema del residuo. Desde el punto de vista operativo, este criterio permite reducir el número de etapas requeridas y el consumo energético asociado, manteniendo una separación técnicamente viable.

Cabe destacar que las especificaciones seleccionadas son consistentes con la naturaleza del sistema Benceno–Tolueno, cuya volatilidad relativa es moderadamente alta bajo las condiciones de operación consideradas. Esto permite alcanzar las purezas deseadas sin requerir un número excesivo de etapas teóricas, manteniendo el diseño dentro de rangos típicos para columnas de destilación de mezclas aromáticas.

Finalmente, estas especificaciones de producto sirven como base para la comparación posterior con los resultados obtenidos mediante simulación rigurosa en ChemSep, permitiendo evaluar el grado de concordancia entre el método gráfico y el modelo computacional, así como la factibilidad real del diseño propuesto.

1.5.6 Equilibrio líquido-vapor

La correcta representación del equilibrio líquido–vapor (ELV) es un paso fundamental en la aplicación del método gráfico de McCabe–Thiele, ya que determina la relación entre las fracciones molares de los componentes en fase líquida y vapor, permitiendo construir la curva de equilibrio utilizada en el diseño de la columna de destilación. Para el sistema pseudobinario Benceno–Tolueno adoptado en este estudio, el ELV se estima empleando las ecuaciones de Antoine, un modelo termodinámico ampliamente utilizado por su simplicidad, precisión y disponibilidad de parámetros experimentales. Este enfoque permite calcular las presiones de vapor individuales de cada componente a una temperatura de referencia previamente seleccionada, lo cual constituye el insumo esencial para aplicar la Ley de Raoult y establecer la relación $y=f(x)$ que define la curva de equilibrio. El uso de las ecuaciones de Antoine garantiza la generación de datos confiables y reproducibles, adecuados para modelar el comportamiento del sistema bajo la suposición de mezcla ideal, presión constante y equilibrio termodinámico. En consecuencia, la metodología desarrollada en este punto constituye la base para la construcción gráfica del proceso de separación y para la posterior estimación del número de etapas teóricas requeridas en la columna.

La Ley de Raoult constituye uno de los pilares fundamentales en la estimación del equilibrio líquido–vapor para sistemas ideales, y su aplicación es particularmente relevante en el presente estudio, donde se modela el sistema pseudobinario Benceno–Tolueno. Esta ley establece que la presión parcial de cada componente en la fase vapor es directamente proporcional a su fracción molar en la fase líquida y a su presión de vapor pura, la cual se obtiene mediante las ecuaciones de Antoine.

1.6 RESULTADOS OBTENIDOS MEDIANTE EL METODO GRAFICO DE McCABE-THIELE

En esta sección se presentan y analizan los resultados obtenidos a partir de la implementación del método gráfico de McCabe–Thiele para la separación del sistema pseudobinario Benceno–Tolueno, empleando los datos de composición, caudal y condiciones de operación definidos anteriormente. Los cálculos termodinámicos y balances necesarios fueron desarrollados mediante una hoja de cálculo en Microsoft Excel, herramienta que permitió sistematizar la estimación del equilibrio líquido–vapor y la construcción de las curvas fundamentales del método.

El uso de Excel facilitó el cálculo iterativo de las fracciones molares en ambas fases, así como la generación de gráficos precisos que representan el comportamiento del sistema bajo las condiciones operacionales seleccionadas. A partir de estos resultados se obtuvo el diagrama y – x , elemento central del método de McCabe–Thiele, sobre el cual se realiza el conteo gráfico de las etapas teóricas requeridas para la separación.

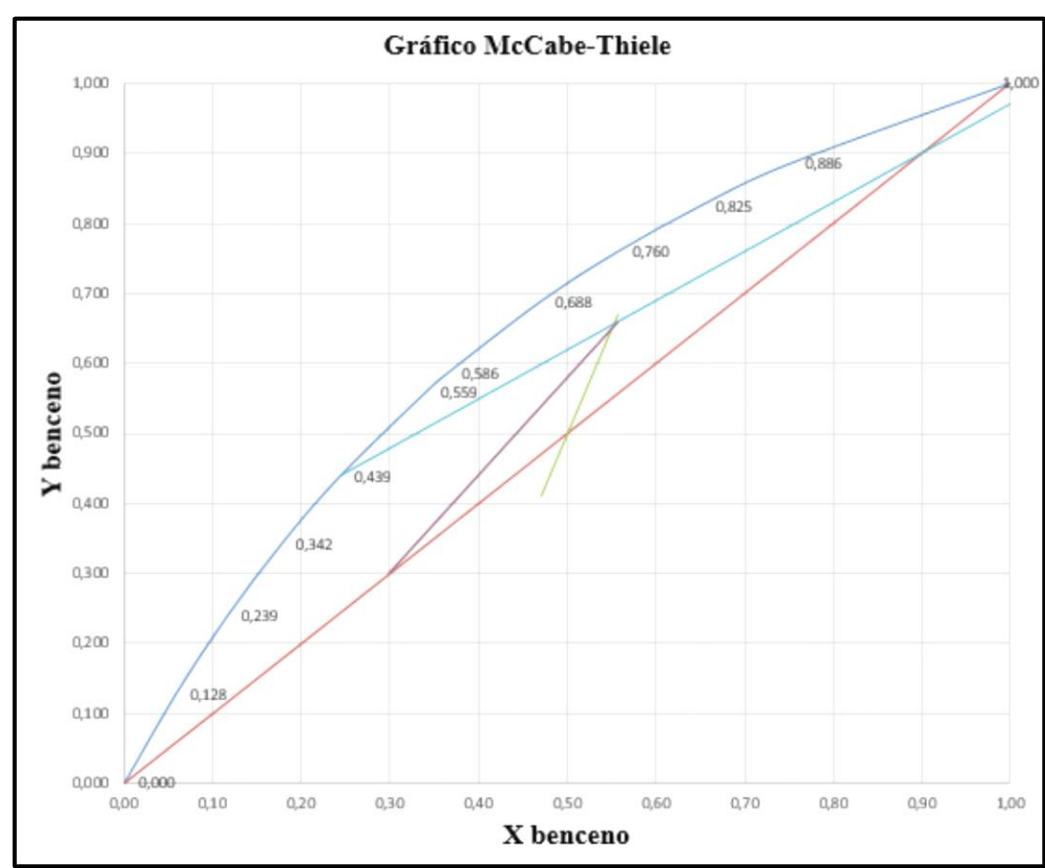
1.6.1 Curva de equilibrio líquido–vapor

La curva de equilibrio líquido–vapor fue construida a partir de la aplicación conjunta de las ecuaciones de Antoine y la Ley de Raoult, considerando una presión constante de 1 atm y una temperatura de referencia de 90 °C. En Excel se calcularon las presiones de vapor puras del benceno y del tolueno, y posteriormente se determinó la composición de la fase vapor en equilibrio con diferentes composiciones de la fase líquida.

Esta curva describe la relación termodinámica entre la fracción molar de benceno en la fase líquida (x) y su correspondiente fracción molar en la fase vapor (y). Dado que el benceno es el componente más volátil, la curva de equilibrio se encuentra por encima de la diagonal $y=x$, indicando una mayor concentración del componente liviano en la fase vapor, lo cual confirma la factibilidad de la separación por destilación.

Figura 1

Curva de equilibrio líquido-vapor



Nota. Captura de pantalla del gráfico de equilibrio líquido–vapor del sistema benceno–tolueno, en el cual se representa la curva $y-x$ que describe la distribución del componente liviano clave entre las fases líquida y vapor a condiciones de operación definidas. Esta curva constituye el fundamento gráfico para la determinación del número de etapas teóricas mediante el método de McCabe–Thiele. Elaboración propia.

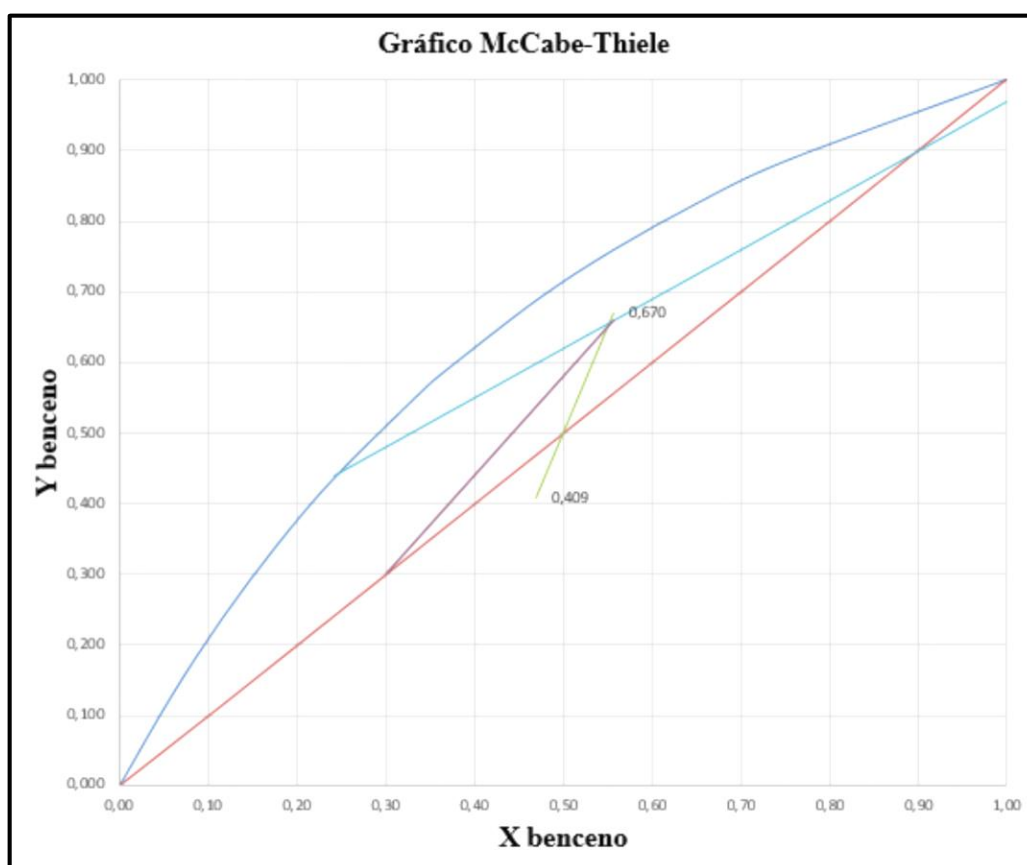
1.6.2 Curva de alimentación (línea q)

La condición térmica de la alimentación se incorpora al análisis mediante la denominada curva o línea de alimentación (línea q). Esta recta se construye utilizando la fracción molar de benceno en la alimentación y el parámetro, que representa la fracción líquida de la corriente de entrada.

La curva de alimentación constituye el nexo entre las secciones de enriquecimiento y agotamiento de la columna, ya que su intersección con las líneas operacionales define el punto exacto en el que ingresa la alimentación y permite determinar la ubicación del plato de alimentación.

Figura 2

Curva de alimentación



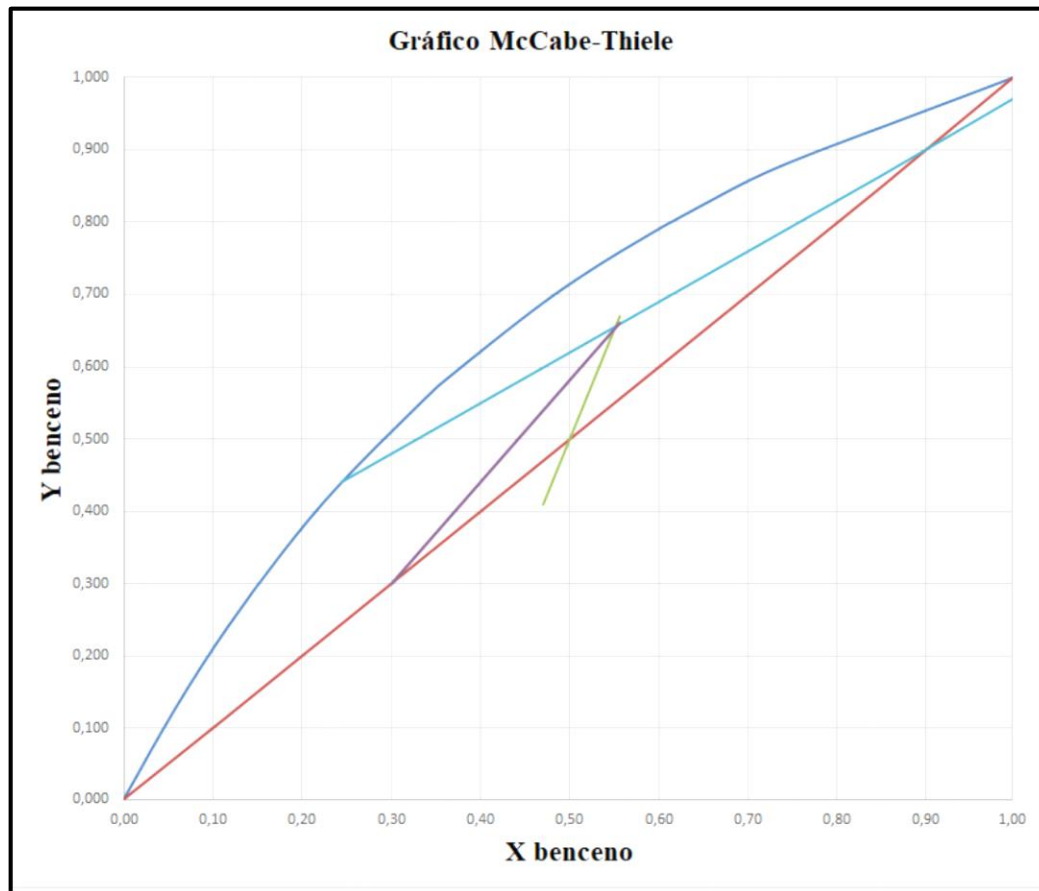
Nota. Captura de pantalla del diagrama de McCabe–Thiele correspondiente a la curva de alimentación (línea q), que representa la condición térmica de la corriente de entrada al sistema benceno–tolueno. Esta curva permite determinar el punto de intersección con las líneas operacionales de enriquecimiento y

agotamiento, siendo un elemento fundamental para la ubicación del plato de alimentación y el cálculo del número de etapas teóricas. Elaboración propia.

1.6.3 Determinación de los puntos de intersección

Los puntos de intersección entre la curva de equilibrio, la línea de alimentación y las líneas operacionales del destilado y del fondo fueron obtenidos de manera gráfica mediante el diagrama generado en Excel. En particular: La intersección de la línea q con la línea de operación de enriquecimiento define el punto de alimentación. A partir del punto correspondiente a la composición del destilado (x_D), se traza la línea de operación superior hasta intersectar la curva de equilibrio. Desde esta intersección se realizan trazos horizontales y verticales sucesivos entre la curva de equilibrio y la línea operacional, representando cada uno una etapa teórica de equilibrio. El procedimiento se repite hasta alcanzar la composición deseada en el fondo (x_B).

Este método gráfico permite visualizar de manera intuitiva el número de etapas teóricas requeridas, así como evaluar el efecto de la relación de reflujo seleccionada sobre la eficiencia de la separación.

Figura 3*Puntos de intersección*

Nota. Captura de pantalla del diagrama de McCabe–Thiele en el que se identifican los puntos de intersección entre la curva de equilibrio líquido–vapor, la línea de alimentación (q) y las líneas operacionales. Estos puntos son fundamentales para el trazado gráfico de las etapas teóricas, la determinación del número de platos requeridos y la ubicación del plato de alimentación en la columna de destilación. Elaboración propia. Elaboración propia.

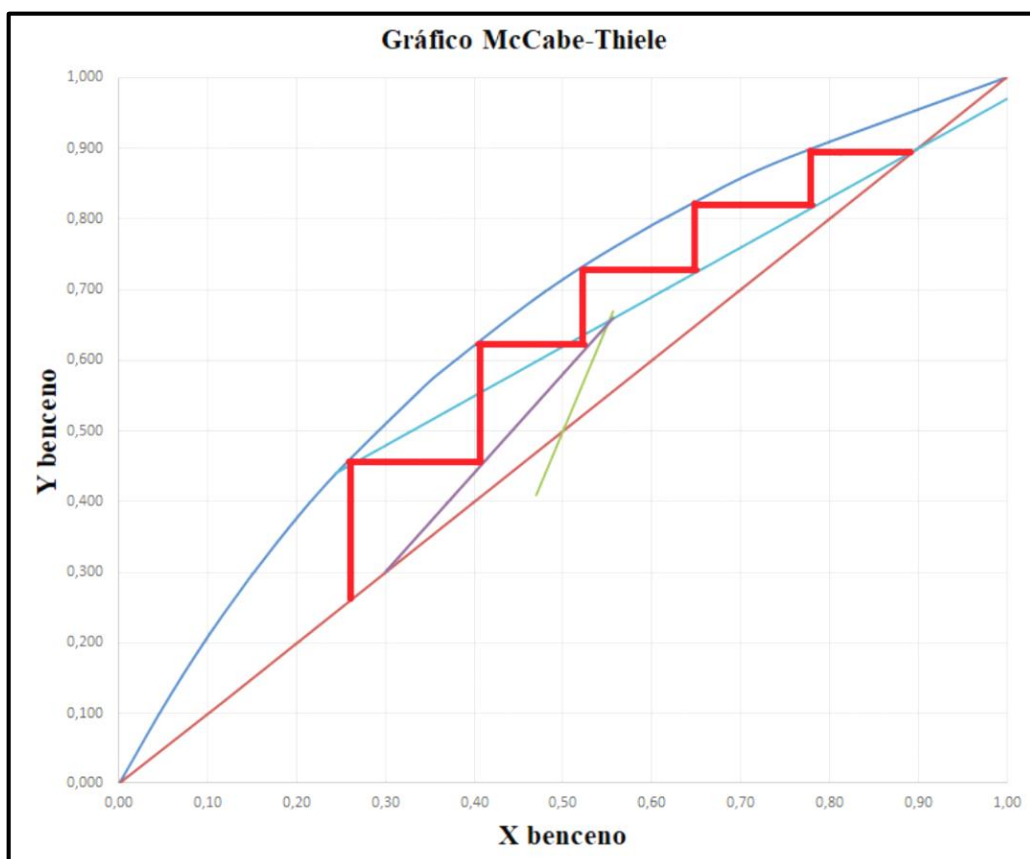
1.6.4 Análisis e interpretación del número de platos teóricos obtenidos

A partir de la aplicación del método gráfico de McCabe–Thiele al sistema pseudobinario Benceno–Tolueno, y utilizando una hoja de cálculo desarrollada en Microsoft Excel, se determinó que la columna de destilación requiere un total de 5 platos teóricos para alcanzar las especificaciones de separación establecidas en este estudio. Este resultado se obtuvo considerando una fracción molar de benceno en el destilado de $x_D=0,90$, una fracción molar de benceno en el fondo de $x_B=0,30$, una composición de alimentación $z_F=0,50$, un caudal total de alimentación de 100 kmol/h, y condiciones de operación de 1 atm y 90 °C.

El número de platos teóricos fue determinado mediante el procedimiento gráfico clásico del método de McCabe–Thiele, consistente en el escalonamiento sucesivo entre la curva de equilibrio líquido–vapor y las líneas operacionales construidas a partir de la relación de reflujo seleccionada. Cada escalón horizontal y vertical representa una etapa teórica de equilibrio, y el conteo se realizó desde la composición del destilado hasta alcanzar la composición objetivo del fondo.

Figura 4

Platos teóricos



***Nota.** Captura de pantalla del diagrama de McCabe–Thiele en el que se presenta el escalonamiento entre la curva de equilibrio líquido–vapor y las líneas operacionales, a partir del cual se determina un total de cinco (5) platos teóricos para la columna de destilación. Elaboración propia.*

El uso de Microsoft Excel permitió reproducir de manera precisa el procedimiento gráfico del método de McCabe–Thiele, asegurando trazabilidad en los cálculos y claridad en la representación gráfica de las curvas de equilibrio, alimentación y líneas operacionales. La obtención de 5 platos teóricos mediante esta herramienta demuestra la consistencia entre los cálculos termodinámicos realizados y la interpretación gráfica del método, reforzando la validez de los resultados presentados.

CAPÍTULO 2: CHEMSEP

La simulación de procesos constituye una herramienta fundamental en la ingeniería química moderna, ya que permite analizar, validar y optimizar el comportamiento de sistemas reales a partir de modelos matemáticos y termodinámicos confiables. En este contexto, el presente capítulo aborda la simulación del proceso de destilación del sistema Benceno–Tolueno mediante el uso del simulador ChemSep, con el objetivo de reproducir y contrastar los resultados obtenidos previamente a través del método gráfico de McCabe–Thiele.

La simulación se desarrolla bajo las mismas condiciones de operación, composición y caudal establecidas en el análisis teórico, garantizando la coherencia y comparabilidad entre ambos enfoques. En particular, se consideran una presión de operación de 1 atm, una corriente de alimentación de 100 kmol/h con una fracción molar de benceno de 0,50, y especificaciones de producto correspondientes a una fracción molar de benceno de 0,90 en el destilado y 0,30 en el fondo. De este modo, la simulación permite evaluar el desempeño de la columna bajo un modelo más riguroso, incorporando balances de materia y energía de forma simultánea.

A diferencia del método gráfico, que se basa en supuestos de equilibrio ideal y condiciones constantes a lo largo de la columna, ChemSep permite modelar el proceso de manera más detallada, considerando variaciones de temperatura, flujos internos y efectos energéticos. Esta diferencia metodológica hace posible analizar el grado de concordancia entre el diseño preliminar obtenido mediante McCabe–Thiele y los resultados de la simulación rigurosa, así como identificar posibles ajustes necesarios en el número de etapas, la relación de reflujo y la ubicación del plato de alimentación.

El desarrollo de este capítulo tiene como finalidad principal validar el número de etapas teóricas y la factibilidad de las especificaciones de separación determinadas en el capítulo anterior. Asimismo, la simulación permite identificar posibles desviaciones, ajustar parámetros operacionales y evaluar la eficiencia del proceso desde una perspectiva más integral.

El desarrollo de este capítulo contempla la definición del modelo termodinámico adecuado para el sistema, la configuración de la columna de destilación en ChemSep y la evaluación de los resultados obtenidos en términos de composiciones de producto, perfiles de temperatura y eficiencia de separación.

De este modo, la simulación computacional se utiliza como una herramienta de validación y apoyo al diseño, fortaleciendo la confiabilidad de los resultados obtenidos en el análisis teórico.

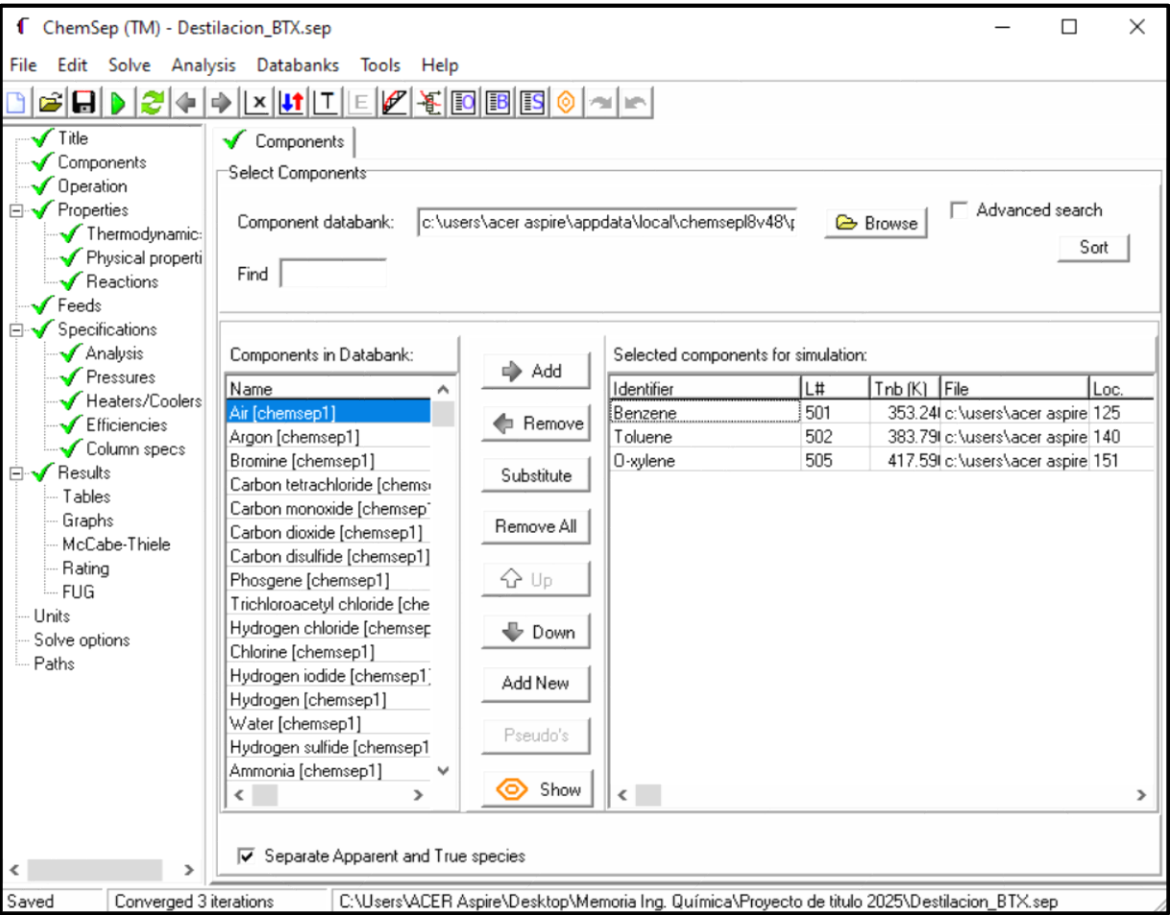
1.7 Resultados de la simulación en ChemSep

1.7.1 Selección de componentes:

La inclusión del o-xileno en la simulación representa una ventaja significativa respecto al método gráfico, ya que permite analizar su distribución a lo largo de la columna, su concentración predominante en las etapas inferiores y su influencia indirecta sobre la separación entre benceno y tolueno. De este modo, la simulación ternaria proporciona una aproximación más cercana al comportamiento real del proceso, sin perder coherencia con el diseño preliminar desarrollado previamente.

Figura 5

Selección de componente en simulador ChemSep



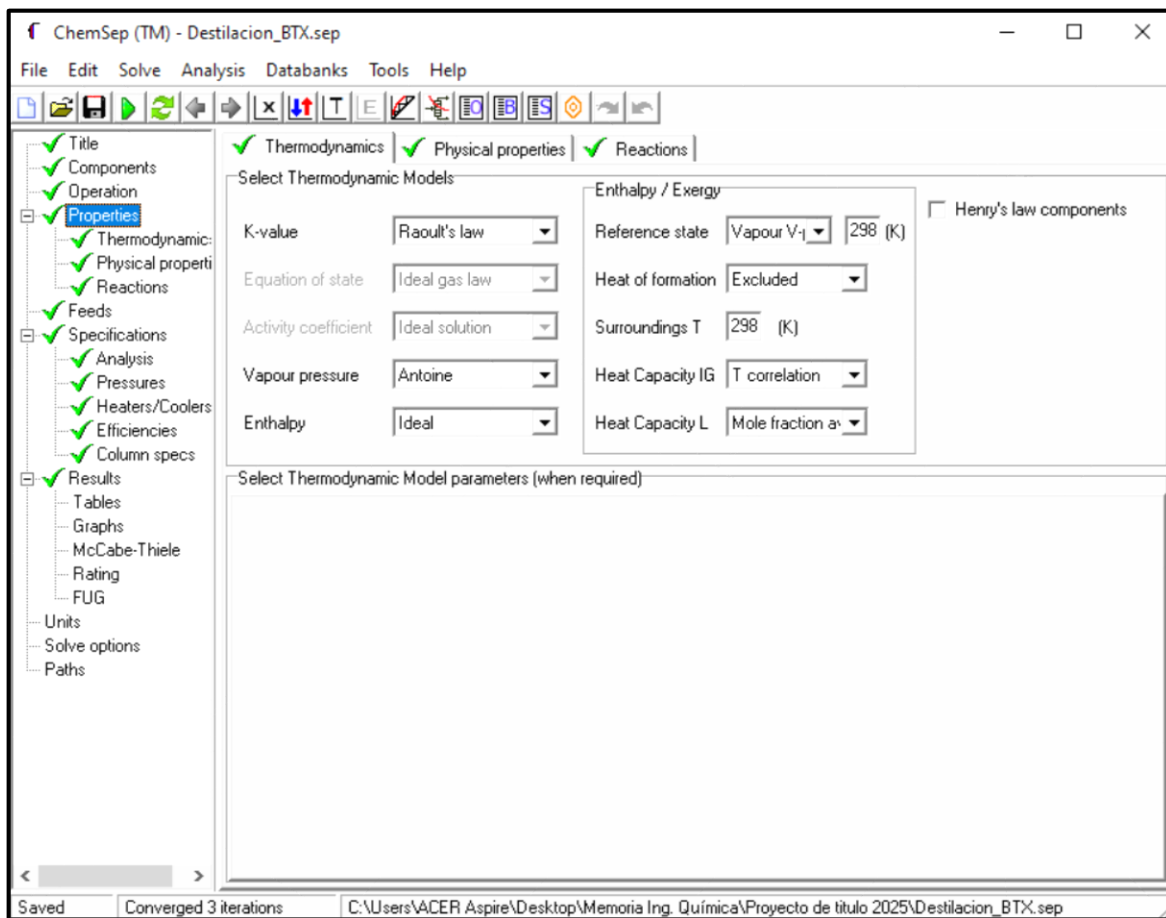
Nota. Captura de pantalla del simulador ChemSep en la que se muestra la selección de los componentes benceno, tolueno y o-xileno, los cuales conforman el sistema BTX analizado. Elaboración propia.

1.7.2 Modelo termodinámico utilizado:

En el presente estudio se optó por utilizar el mismo modelo termodinámico tanto en el desarrollo del método gráfico de McCabe–Thiele como en la simulación rigurosa realizada en ChemSep, con el objetivo de garantizar la coherencia, comparabilidad y consistencia de los resultados obtenidos mediante ambos enfoques.

Figura 6

Modelo termodinámico en simulador ChemSep



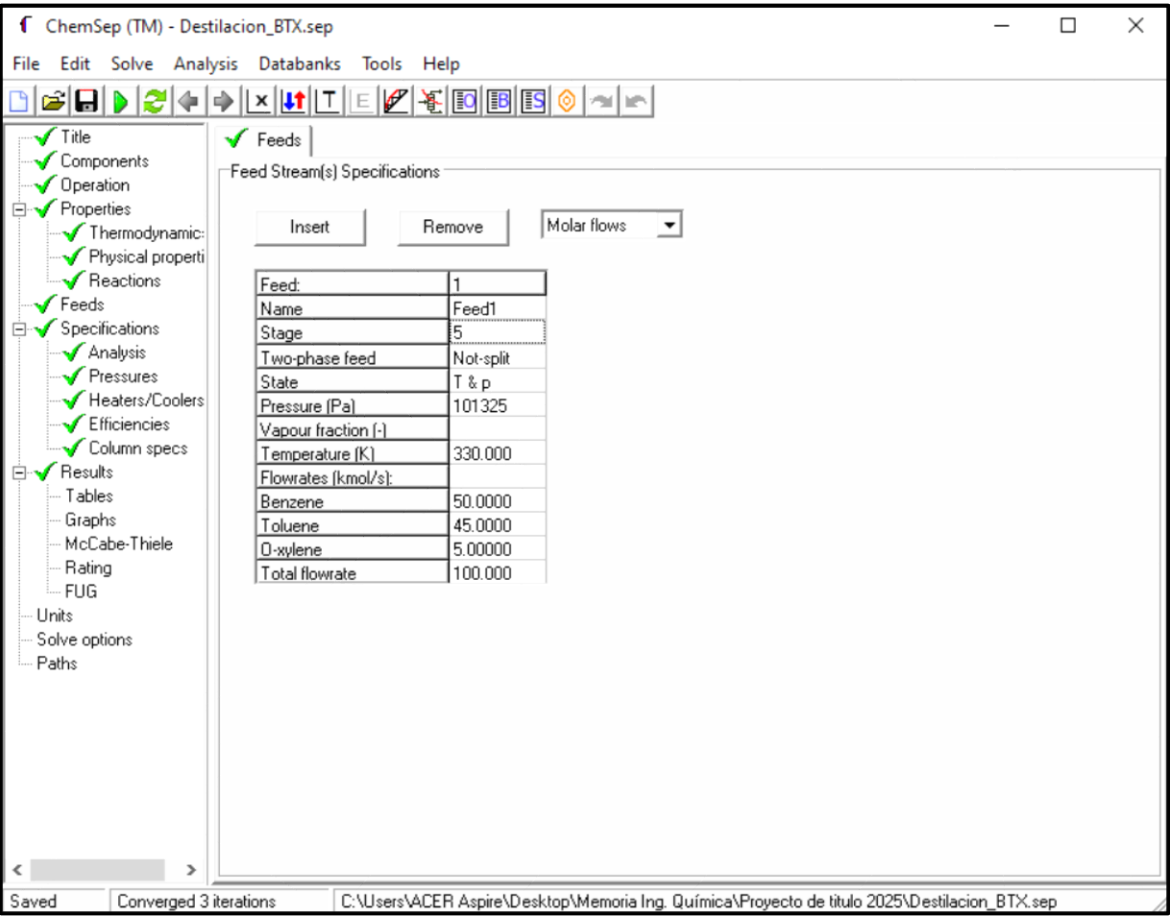
Nota. Captura de pantalla del simulador ChemSep correspondiente a la selección del modelo termodinámico empleado para la simulación del sistema benceno–tolueno–o-xileno. El modelo seleccionado permite describir adecuadamente el equilibrio líquido–vapor del sistema y garantiza la coherencia entre el análisis teórico y la simulación rigurosa del proceso de destilación. Elaboración propia.

1.7.3 Definición de las condiciones de operación

La simulación de la columna de destilación en ChemSep se realizó bajo condiciones de operación coherentes con el análisis teórico desarrollado previamente mediante el método de McCabe–Thiele. Estas condiciones fueron seleccionadas con el objetivo de asegurar la comparabilidad entre el enfoque gráfico y la simulación rigurosa, permitiendo evaluar el desempeño de la columna bajo un marco operacional común. En la Figura 2.X se presenta el pantallazo correspondiente a la definición de las condiciones de operación en el simulador ChemSep, que constituye la base para la obtención de los resultados analizados en las secciones posteriores.

Figura 7

Condiciones de operación en simulador ChemSep



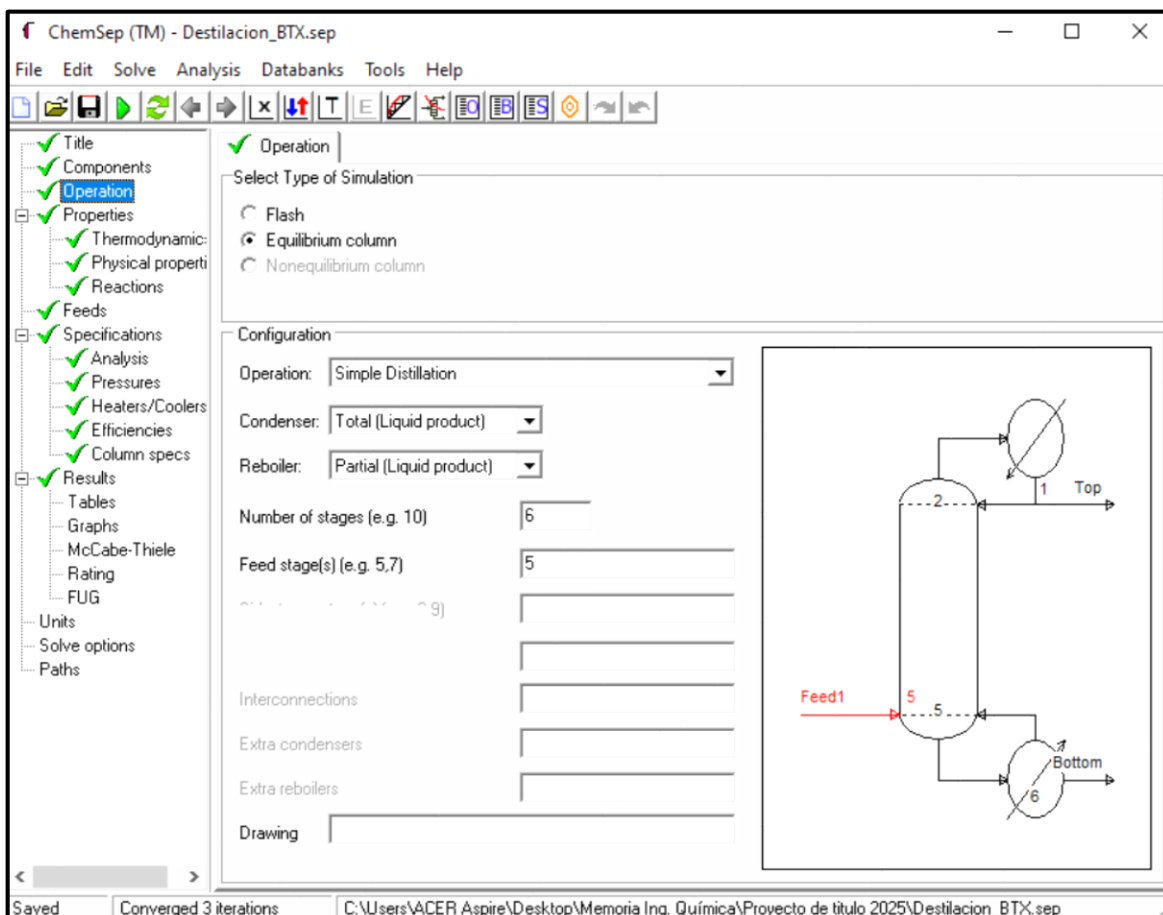
Nota. Captura de pantalla del simulador ChemSep en la que se presentan las condiciones de operación definidas para la simulación de la columna de destilación. Elaboración propia.

1.7.4 Configuración de la columna de destilación

La columna de destilación fue configurada en el simulador ChemSep de acuerdo con los parámetros definidos en el análisis teórico, considerando el número de etapas teóricas, la ubicación del plato de alimentación y las especificaciones de los productos. Esta configuración permite representar adecuadamente el comportamiento del sistema ternario benceno–tolueno–o-xileno bajo las condiciones de operación establecidas.

Figura 8

Columna de destilación en simulador ChemSep



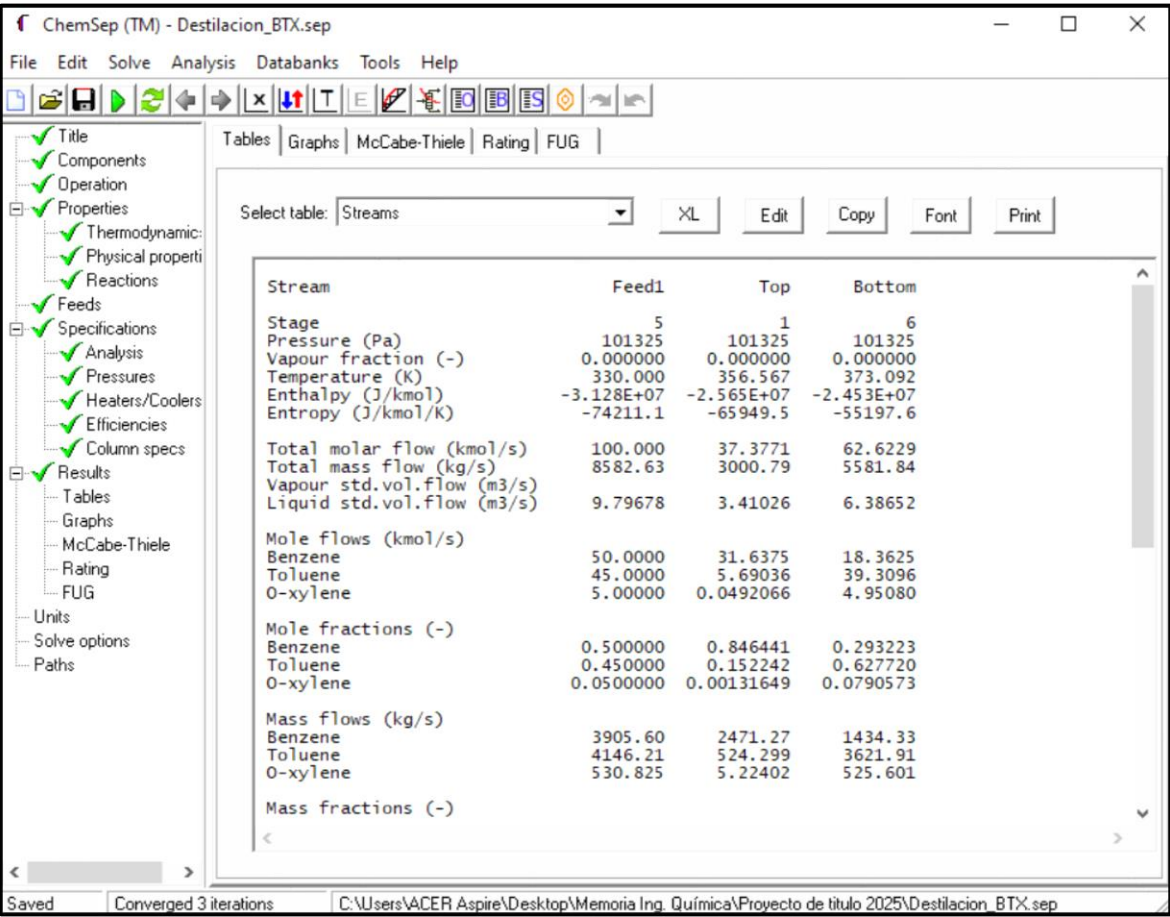
Nota. Captura de pantalla del simulador ChemSep en la que se muestra la configuración de la columna de destilación del sistema BTX, incluyendo el número total de etapas teóricas y la ubicación del plato de alimentación. Elaboración propia.

1.7.5 Resultados de la simulación

La simulación de la columna de destilación realizada en el simulador de procesos ChemSep permitió evaluar de manera rigurosa el comportamiento del sistema ternario benceno–tolueno–o-xileno bajo las condiciones de operación previamente definidas. A diferencia del método gráfico de McCabe–Thiele, que se basa en un modelo pseudobinario y en suposiciones simplificadas, la simulación incorpora el equilibrio multicomponente y el cálculo simultáneo de balances de materia y energía, proporcionando una representación más cercana al comportamiento real del proceso.

Figura 9

Resultados de composición de la columna



Nota. *Captura de pantalla del simulador ChemSep que presenta los resultados de composición del destilado y del fondo de la columna de destilación para el sistema benceno–tolueno–o-xileno. Elaboración Propia.*

Los resultados obtenidos evidenciaron que el simulador no solo replica el comportamiento idealizado esperado para los componentes claves, sino que además incorpora los efectos propios de un sistema multicomponente real, tales como la distribución residual del O-xileno entre las fases y la presencia de etapas adicionales asociadas al equilibrio. Esto valida la utilidad del simulador como herramienta de verificación y ajuste del diseño preliminar obtenido mediante métodos gráficos.

Finalmente, la información generada en esta etapa conforma la base para la discusión comparativa del capítulo siguiente, donde se evaluará la correspondencia entre ambos enfoques y se analizará la aplicabilidad del método de McCabe–Thiele en la modelación de sistemas ternarios, estableciendo los alcances y limitaciones de cada metodología dentro del contexto del diseño conceptual de columnas de destilación.

3 CAPITULO 3: McCABE-THIELE VS CHEMSEP

El presente capítulo tiene como objetivo comparar y evaluar los resultados obtenidos mediante el método gráfico de McCabe–Thiele y la simulación rigurosa realizada en el simulador de procesos ChemSep, con el fin de determinar la precisión y aplicabilidad del método teórico en el análisis de sistemas multicomponentes. Para ello, se analizaron las principales variables relacionadas con el diseño de la columna de destilación, tales como el número de etapas teóricas, la ubicación del plato de alimentación y las composiciones de los productos obtenidos.

Ambos métodos fueron aplicados bajo condiciones de operación equivalentes, manteniendo la misma presión de operación, temperatura de referencia y especificaciones de producto, lo que permite realizar una comparación directa y consistente entre los resultados teóricos y simulados.

3.1 Comparación de las condiciones de operación

El análisis mediante el método de McCabe–Thiele se desarrolló considerando una alimentación con fracción molar de benceno $x_F=0,50$, $x_F = 0,50$, una fracción molar de benceno en el destilado $x_D=0,90$, $x_D = 0,90$ y una fracción molar de benceno en el fondo $x_B=0,30$, $x_B = 0,30$. Asimismo, se asumió una condición térmica de la alimentación caracterizada por un parámetro $q=1,5$, lo que representa una alimentación subenfriada y se traduce en una línea de alimentación con pendiente pronunciada en el diagrama de McCabe–Thiele.

Las condiciones de operación se completaron con una presión constante de 1 atm y una temperatura de referencia de 90 °C, utilizadas para la estimación del equilibrio líquido–vapor. Estas mismas condiciones fueron implementadas en la simulación en ChemSep, donde se definió una alimentación multicomponente compuesta por benceno, tolueno y o-xileno, con fracciones molares de 0,50, 0,45 y 0,05, respectivamente.

La coherencia en la definición de estas condiciones permitió asegurar que las diferencias observadas entre ambos métodos respondieran principalmente a las aproximaciones inherentes a cada enfoque y no a variaciones en los parámetros operacionales.

3.2 Comparación del número de etapas teóricas

Uno de los principales parámetros de diseño evaluados en este estudio corresponde al número de etapas teóricas requeridas para cumplir con las especificaciones de separación. Mediante el método gráfico de McCabe–Thiele se determinó un total de 5 etapas teóricas para la columna de destilación, bajo las condiciones previamente definidas.

Por otro lado, la simulación rigurosa realizada en ChemSep arrojó como resultado un total de 6 etapas teóricas, considerando explícitamente el comportamiento multicomponente del sistema y la resolución simultánea de los balances de materia y energía. La diferencia de una etapa entre ambos resultados es relativamente pequeña y se encuentra dentro de un margen esperable, considerando las simplificaciones propias del método gráfico.

Esta discrepancia puede atribuirse principalmente a la inclusión del o-xileno en la simulación, componente que no es considerado de manera explícita en el método de McCabe–Thiele y que introduce efectos adicionales sobre el equilibrio y la distribución de los componentes a lo largo de la columna. En este sentido, la simulación tiende a proporcionar un diseño ligeramente más conservador, lo cual es consistente con prácticas habituales de diseño industrial.

3.3 Comparación de las composiciones de los productos

En cuanto a las composiciones obtenidas, el método de McCabe–Thiele fue diseñado para alcanzar una fracción molar de benceno en el destilado de $x_D=0,90$ y una fracción molar de benceno en el fondo de $x_B=0,30$. La simulación en ChemSep arrojó como resultado una fracción molar de benceno en el destilado de 0,846 y una fracción molar en el fondo de 0,293.

Estos valores muestran una buena concordancia con las especificaciones teóricas, especialmente considerando la naturaleza multicomponente del sistema simulado. La ligera desviación en la composición del destilado puede atribuirse a la presencia del tolueno y del o-xileno, que compiten por las etapas superiores de la columna y afectan el enriquecimiento del benceno.

Los resultados obtenidos muestran una alta concordancia entre el método gráfico de McCabe–Thiele y la simulación en ChemSep en términos de composiciones

de producto. La similitud alcanzada es de 93,62 % en el destilado y 97,61 % en el fondo, valores que confirman que el método gráfico permite estimar adecuadamente las especificaciones de separación, aun cuando se aplica a un sistema multicomponente mediante una aproximación pseudobinaria.

Estas diferencias reducidas se explican por la consideración explícita del o-xileno en la simulación, así como por la resolución rigurosa del equilibrio multicomponente y los balances energéticos en ChemSep. No obstante, la elevada similitud obtenida respalda la aplicabilidad del método de McCabe–Thiele como herramienta válida para el diseño preliminar de columnas de destilación y justifica su uso en etapas tempranas del análisis de procesos.

3.4 Comparación de resultados

En la Tabla 2 se presenta una comparación directa entre los resultados obtenidos mediante el método gráfico de McCabe–Thiele y la simulación rigurosa realizada en ChemSep. Se incluyen los principales parámetros de diseño y desempeño de la columna de destilación, junto con las diferencias absolutas y los porcentajes de similitud, con el fin de evaluar la concordancia entre ambos enfoques.

Tabla 2

Comparación de resultados

Parámetro	McCabe-Thiele	ChemSep	Diferencia absoluta	Similitud (%)
Número de etapas teóricas	5	6	1 etapa	83,3%
Fracción molar del benceno en la alimentación (Xf)	0,50	0,50	0,00	100%
Fracción molar del benceno en el destilado (Xd)	0,90	0,846	0,054	93,6%
Fracción molar del benceno en el fondo (Xb)	0,30	0,293	0,007	97,6%

Los resultados evidencian una alta concordancia entre ambos métodos, particularmente en las composiciones de producto, donde se alcanzan similitudes superiores al 90 %. La diferencia observada en el número de etapas teóricas se considera aceptable y coherente con las simplificaciones inherentes al método gráfico, confirmando su aplicabilidad como herramienta de diseño preliminar en sistemas multicomponentes.

3.5 Evaluación de la aplicabilidad del método de McCabe–Thiele

Los resultados obtenidos permiten concluir que el método de McCabe–Thiele constituye una herramienta válida y confiable para el diseño preliminar de columnas de destilación, incluso cuando se aplica a sistemas multicomponentes mediante una aproximación pseudobinaria. La cercanía entre los valores de número de etapas, ubicación del plato de alimentación y composiciones de los productos demuestra que las simplificaciones adoptadas no comprometen significativamente la calidad de las estimaciones.

No obstante, la simulación rigurosa en ChemSep evidencia la importancia de considerar el comportamiento multicomponente en etapas posteriores del diseño, especialmente cuando se requiere una predicción más precisa del desempeño de la columna. En este contexto, el método gráfico resulta especialmente útil como primera aproximación, mientras que la simulación constituye una herramienta indispensable para la validación y refinamiento del diseño.

El método de McCabe–Thiele se basa en una serie de supuestos simplificadores, entre los que destacan la consideración de un sistema pseudobinario, el uso de una curva de equilibrio definida a condiciones promedio y la omisión explícita de componentes no clave. En contraste, la simulación en ChemSep resuelve de manera simultánea los balances de materia y energía para un sistema multicomponente, incorporando la influencia del o-xileno sobre el equilibrio y la distribución de los componentes a lo largo de la columna. Como consecuencia, la simulación tiende a entregar resultados ligeramente más conservadores, reflejados en un mayor número de etapas teóricas.

Desde un punto de vista cuantitativo, la diferencia relativa entre ambos métodos puede expresarse como un porcentaje. Considerando el número de etapas obtenido en la simulación como referencia, la diferencia de una etapa representa aproximadamente un 16,7 % de desviación, lo que equivale a un 83,3 % de similitud entre ambos resultados. Este nivel de concordancia es elevado para un método gráfico de carácter preliminar y confirma la validez del enfoque de McCabe–Thiele como herramienta de estimación inicial.

Asimismo, es importante destacar que en la práctica del diseño industrial es habitual redondear el número de etapas hacia valores superiores, con el fin de incorporar márgenes de seguridad operacionales. En este contexto, el resultado entregado por la simulación puede interpretarse como una corrección natural del diseño preliminar obtenido por el método gráfico, sin invalidar las conclusiones del análisis teórico.

En consecuencia, la diferencia observada en el número de etapas no solo es aceptable, sino que refuerza el rol complementario de ambos métodos: el método de McCabe–Thiele permite obtener una estimación rápida y razonable del diseño de la columna, mientras que la simulación en ChemSep proporciona un ajuste más preciso al considerar el comportamiento real del sistema multicomponente. Esta coherencia entre resultados respalda la aplicabilidad del método gráfico en etapas tempranas del diseño y justifica su uso en el análisis de sistemas multicomponentes bajo un enfoque pseudobinario.

DISCUSIONES

Bajo las condiciones de operación definidas, el método de McCabe–Thiele permitió determinar un requerimiento de cinco etapas teóricas para alcanzar las especificaciones de separación, evidenciando la utilidad del método como herramienta de diseño preliminar. La simulación rigurosa realizada en el simulador ChemSep, incorporando explícitamente el carácter multicomponente del sistema mediante la inclusión del o-xileno, arrojó un total de seis etapas teóricas, con la alimentación ubicada en el quinto plato. La diferencia observada entre ambos métodos fue limitada y se considera aceptable desde el punto de vista de ingeniería.

En términos de composición de producto, los resultados obtenidos mediante simulación mostraron una alta similitud con los valores teóricos planteados, alcanzando fracciones molares de benceno de 0,846 en el destilado y 0,293 en el fondo. Estas diferencias, inferiores al 6 % en ambos productos, confirman la validez del método gráfico para la estimación inicial del desempeño de separación.

La utilización del mismo modelo termodinámico en el análisis gráfico y en la simulación permitió asegurar coherencia en la estimación del equilibrio líquido–vapor, evitando discrepancias atribuibles a diferencias termodinámicas y reforzando la comparabilidad de los resultados obtenidos por ambos enfoques.

Los resultados del estudio demuestran que el método de McCabe–Thiele, pese a sus simplificaciones, mantiene una adecuada capacidad predictiva cuando se aplica a sistemas multicomponentes que pueden representarse de forma pseudobinaria. No obstante, se evidencia la necesidad de complementar este método con simulaciones rigurosas para obtener un diseño más preciso y representativo del comportamiento real del sistema.

Una de las diferencias más relevantes observadas entre el análisis gráfico mediante el método de McCabe–Thiele y la simulación computacional realizada en ChemSep es la presencia de trazas de O-xileno en el destilado y en el fondo de la columna simulada, mientras que en el método gráfico este componente se considera implícitamente ausente. Esta discrepancia se explica por la forma en que cada método aborda el sistema multicomponente y los supuestos termodinámicos asociados.

El método de McCabe–Thiele está formulado estrictamente para sistemas binarios, motivo por el cual el sistema ternario Benceno–Tolueno–O-xileno debe ser reducido a un sistema pseudobinario, donde el Benceno actúa como componente liviano clave (LK) y el Tolueno como componente pesado clave (HK). Bajo este enfoque, el tercer componente (O-xileno) es tratado como pesado no clave, suponiéndose que permanece en el fondo y no participa en el equilibrio líquido–vapor del par binario principal. Este supuesto ingenieril simplifica el diseño preliminar de la columna y permite la obtención de una estimación rápida del número de etapas teóricas, pero omite explícitamente la contribución real del tercer componente en el equilibrio.

En contraste, el simulador ChemSep incorpora el sistema ternario completo, aplicando las ecuaciones de equilibrio para los tres componentes simultáneamente. Esto permite que el O-xileno, aunque sea el componente de menor volatilidad del sistema, participe del proceso de vaporización y condensación en cantidades muy pequeñas, lo que explica su presencia residual tanto en el destilado como en el reflujo y en el fondo. Desde el punto de vista termodinámico, ningún componente tiene una volatilidad estrictamente nula, y por lo tanto todos presentan una cierta distribución entre ambas fases.

La existencia de este remanente en la simulación constituye un resultado coherente con el comportamiento real del sistema, mientras que su ausencia en McCabe–Thiele obedece a la idealización del diseño preliminar. En términos ingenieriles, esta diferencia es aceptable y esperada, ya que el método gráfico no pretende reproducir el sistema de forma rigurosa, sino proporcionar dimensiones iniciales para la etapa conceptual, que posteriormente serán refinadas mediante herramientas de simulación o datos experimentales.

En consecuencia, la presencia de O-xileno en los resultados de ChemSep no implica un error, sino que refleja la naturaleza multicomponente del equilibrio líquido–vapor. Asimismo, confirma la necesidad de complementar los métodos analíticos tradicionales con simulación computacional para el diseño definitivo de equipos de separación cuando se trabaja con mezclas reales más allá del binario ideal.

En conclusión, el uso combinado del método gráfico de McCabe–Thiele y la simulación en ChemSep constituye una estrategia eficaz para el análisis, diseño y evaluación de columnas de destilación, permitiendo integrar simplicidad conceptual con rigor computacional, particularmente en sistemas de relevancia industrial como el sistema BTX.

BIBLIOGRAFIA

Seader, J. D., Henley, E. J., & Roper, D. K. (2011). *Separation Process Principles*. Wiley.

McCabe, W. L., Smith, J. C., & Harriott, P. (2005). *Unit Operations of Chemical Engineering*. McGraw-Hill.

McCabe, W. L., Smith, J. C., & Harriott, P. (2005). *Operaciones unitarias en ingeniería química* (7.^a ed.). McGraw-Hill.

ChemSep. (2023). *ChemSep process simulator*. Recuperado de: <https://www.chemsep.org/>

ChemSep. (2023). *ChemSep process simulator*. Recuperado de: <https://www.chemsep.org/>

NIST Chemistry WebBook. (2023). *Thermophysical Properties of Chemical Substances*. Recuperado de: <https://webbook.nist.gov/>