

CAPÍTULO IV

IV.1 Correlación de los resultados experimentales

La aplicación de modelos de solución para correlacionar los resultados que se obtienen en los experimentos, resulta de gran importancia para ampliar la visión del comportamiento del sistema y tener un parámetro de comparación sobre la validez de los resultados experimentales obtenidos. Se realizó una revisión bibliográfica sobre los modelos que correlacionan datos experimentales del equilibrio de fases líquido-líquido, y se eligieron los modelos de UNIQUAC (Universal Quasi-Chemical Activity Coefficients) y NRTL (Non Random Two Liquids). Estos modelos son adecuados para correlacionar datos de equilibrio líquido-líquido de sistemas ternarios.

IV.2 Modelo NRTL

El modelo de NRTL fue desarrollado por Renon y Prausnitz (1968) es aplicable a sistemas parcialmente miscibles. El fundamento para la derivación de la ecuación NRTL es una teoría de dos fluidos, en la cuál se asume que un líquido tiene una estructura hecha de celdas de moléculas de dos tipos, en una mezcla binaria cada molécula se considera que está rodeada por moléculas de ambos tipos, en proporciones determinadas por la energía de interacción de Gibbs.

Para el modelo de NRTL la energía de exceso de Gibbs está dada por la ecuación (4.1), además contiene los parámetros de las ecuaciones (4.2) y (4.3).

$$\frac{g^E}{RT} = x_1 x_2 \left[\frac{G_{21} \tau_{21}}{x_1 + x_2 G_{21}} + \frac{G_{12} \tau_{12}}{x_2 + x_1 G_{12}} \right] \quad (4.1)$$

$$\tau_{12} = \frac{g_{12} - g_{22}}{RT} \quad \tau_{21} = \frac{g_{21} - g_{11}}{RT} \quad (4.2)$$

$$G_{12} = \exp(-\alpha_{12}\tau_{12}) \quad G_{21} = \exp(-\alpha_{21}\tau_{21}) \quad (4.3)$$

donde g_{ij} representa el parámetro de energía característico de la interacción ij . El parámetro α_{12} se relaciona con la no aleatoriedad en la mezcla. De acuerdo con un gran número de resultados para la ecuación de NRTL indican que α_{12} varía de 0.20 a 0.47. Para el presente trabajo el se utilizó un valor de $\alpha_{ij}=0.2$ para los sistemas estudiados.

A partir de la ecuación (4.1) los coeficientes de actividad se expresan con las ecuaciones (4.4) y (4.5).

$$\ln \gamma_1 = x_2^2 \left[\tau_{21} \left(\frac{G_{21}}{x_1 + x_2 G_{21}} \right)^2 + \left(\frac{\tau_{12} G_{12}}{(x_2 + x_1 G_{12})^2} \right) \right] \quad (4.4)$$

$$\ln \gamma_2 = x_1^2 \left[\tau_{12} \left(\frac{G_{12}}{x_2 + x_1 G_{12}} \right)^2 + \left(\frac{\tau_{21} G_{21}}{(x_1 + x_2 G_{21})^2} \right) \right] \quad (4.5)$$

Aplicando la ecuación de NRTL para un sistema multicomponente, la energía de exceso de Gibbs se expresa mediante la ecuación (4.6).

$$\frac{gE}{RT} = \sum_{i=1}^m x_i \frac{\sum_{j=1}^m \tau_{ji} G_{ji} x_j}{\sum_{i=1}^m G_{ii} x_{ii}} \quad (4.6)$$

donde

$$\tau_{ij} = \frac{g_{ji} - g_{ii}}{RT} \quad (4.7)$$

$$G_{ji} = \exp(-\alpha_{ji}\tau_{ji}) \quad (\alpha_{ji} = \alpha_{ij}) \quad (4.8)$$

El coeficiente de actividad para el componente i en la mezcla esta dado por la ecuación (4.9).

$$\ln \gamma_i = \frac{\sum_{j=1}^m \tau_{ji} G_{ji} x_j}{\sum_{l=1}^m G_{li} x_l} + \sum_{j=1}^m \frac{x_j G_{ij}}{\sum_{l=1}^m G_{lj} x_l} \left[\tau_{ij} - \frac{\sum_{n=1}^m x_n \tau_{nj} G_{nj}}{\sum_{l=1}^m G_{ij} x_l} \right] \quad (4.9)$$

Las ecuaciones (4.1) y (4.4) solamente contienen parámetros obtenidos de datos para sistemas binarios (Smith, 1997; Van Ness and Abbott, 1996; Walas, 1985; Prausnitz et al., 1986).

IV.3 Modelo UNIQUAC

La ecuación UNIQUAC trata la energía libre de Gibbs $g = G^E / RT$ como constituida de dos partes aditivas, un término combinatorio g^C , que explica el tamaño molecular y las diferencias de forma, y un término residual g^R que estima las interacciones moleculares.

$$g = g^C + g^R$$

La función g^C contiene únicamente parámetros de componentes puros, mientras que la función g^R incluye dos parámetros de interacción por cada par de moléculas. Para un sistema de multicomponentes esta relación se expresa de la manera siguiente:

$$g^C = \sum_i x_i \ln \frac{\phi_i}{x_i} + 5 \sum_i q_i x_i \ln \frac{\theta_i}{\phi_i} \quad (4.10)$$

y

$$g^R = - \sum_i q'_i x_i \ln(\phi'_j \tau_{ji}) \quad (4.11)$$

donde ϕ y θ son la fracción del segmento y la fracción del área, y están dadas por:

$$\phi_i = \frac{x_i r_i}{\sum_j x_j r_j} \quad \theta_i = \frac{x_i q_i}{\sum_j x_j q_j} \quad \theta'_i = \frac{x_i q'_i}{\sum_j x_j q'_j}$$

Los subíndices i identifican especies, τ_i (volumen molecular relativo) y q_i (un área superficial molecular relativa) son parámetros de los componentes puros. La influencia de la temperatura sobre g se introduce por medio de parámetros de interacción τ_{ji} de la ecuación (4.11), los cuales son dependientes de la temperatura:

$$T_{ji} = \exp \frac{-(u_{ji} - u_{ii})}{RT} \quad (4.13)$$

Los parámetros de interacción para la ecuación de UNIQUAC son las diferencias $(u_{ji} - u_{ii})$. Para un componente i , el coeficiente de actividad está dado por la ecuación (4.14).

$$\ln \gamma_i = \ln \frac{\phi_i^*}{x_i} + \frac{z}{2} q_i \ln \frac{\theta}{\phi_i^*} + l_i - \frac{\phi_i^*}{x_i} \sum x_j l_j - q_i \ln \left(\sum_j \theta_j \tau_{ji} \right) + q_i - q_i \sum_j \frac{\theta_j \tau_{ij}}{\sum_k \theta_k \tau_{kj}} \quad (4.14)$$

Donde

$$l_j = \frac{z}{2} (r_j - q_j) - (r_j - 1) \quad (4.15)$$

Las ecuaciones obtenidas describen el modelo de UNIQUAC (Smith, 1997; Van Ness and Abbott, 1996; Walas, 1985; Prausnitz et al., 1986).

IV.4 Detalles del algoritmo empleado en el presente trabajo

En el presente trabajo se utilizaron los algoritmos mostrados por García-Sánchez et al. (1997), basados en los modelos descritos por Sorensen y Arlt (1980), para los modelos de NRTL (Renon y Prausnitz, 1968) y UNIQUAC (Abrams y Prausnitz, 1975).

El procedimiento para el cálculo del equilibrio de fases de sistemas multicomponentes en términos de la energía libre de Gibbs de exceso (García-Sánchez et al., 1997, García Flores, 2004), en el cual la prueba de estabilidad termodinámica está basada en el criterio de plano tangente descrito por Michelsen (1982). La prueba de estabilidad está basada en

la energía libre de Gibbs, cuando una mezcla homogénea se divide en dos fases y no hay decremento en la energía libre de Gibbs, entonces la mezcla es estable. El criterio de estabilidad se puede escribir para toda concentración x , en términos del coeficiente de actividad γ_i como:

$$F(x) = \sum_{i=1}^N x_i [\ln x_i + \ln \gamma_i(x) - h_i] \geq 0 \quad (4.16)$$

Donde $F(x)$ es la función de la mínima distancia de separación de la energía libre de Gibbs al plano tangente, x_i , es la fracción molar del componente i , γ_i , es el coeficiente de actividad del componente i , h_i , está dada por:

$$h_i = \ln x_i^{(\phi)} + \ln \gamma_i(x^{(\phi)}) \quad i=1, \dots, N \quad (4.17)$$

donde $(x^{(\phi)})$ es la concentración a la cual se tiene la mínima distancia de separación de la energía libre de Gibbs al plano tangente.

Por lo tanto, $F(x)$ es positiva en todos sus términos.

Para el cálculo del equilibrio de fases se utilizan dos métodos de minimización de la energía libre de Gibbs. El cálculo consiste en encontrar el mínimo global de la energía libre de Gibbs, a una temperatura y una presión específicas. La minimización comienza con un juego de parámetros para calcular el número de fases en equilibrio y la concentración global del sistema. Un adecuado valor de los parámetros iniciales determina la precisión de la correlación realizada a los datos experimentales del equilibrio líquido-líquido de los sistemas estudiados.

En el presente trabajo se utilizaron las funciones de minimización de la suma de diferencias cuadradas entre el valor experimental y calculado por los logaritmos de los coeficientes de actividad en la ecuación (4.18) y la minimización de la suma de diferencias cuadradas entre el valor experimental y calculado de las fracciones molares para la ecuación (4.19).

$$F_x = \sum_{k=1}^{N_{eq}} \sum_{i=1}^N w_{ij} \left[\ln(x_{ij} \gamma_{ij}) I - \ln(x_{ij} \gamma_{ij}) II \right] + Q \sum_{m=1}^{N_{par}} P^2 m \quad (4.18)$$

donde w_{ij} es el factor de peso asociado al componente i de la línea j , x_{ij} es la concentración experimental en fracción molar del componente i de la línea unión j , γ_{ij} es el coeficiente de actividad del componente i de la línea de unión j calculado con el modelo de solución, pm representa los parámetros del modelo y los números I y II indican cada una de las fases en equilibrio.

$$F_x = \sum_{k=1}^{N_{eq}} \sum_{j=1}^{N_{ph}} \sum_{i=1}^N w_{ijk} (x_{ijk} - \hat{x}_{ijk})^2 + Q \sum_{m=1}^{N_{par}} P^2 m \quad (4.19)$$

donde w_{ijk} , x_{ijk} y \hat{x}_{ijk} , representan, el factor peso, la concentración experimental y la concentración calculada en fracción molar respectivamente, del componente i en la fase j y la línea k .

El segundo término de las ecuaciones (4.18 y 4.19), es adicionado a la función objetivo F_a y F_x , para asegurar que se puedan obtener valores de los parámetros relativamente pequeños sin incrementar los mínimos de esas funciones y de esta forma evitar el riesgo de soluciones múltiples.

La comparación entre las concentraciones experimental y calculada se define a partir de los valores de la desviación cuadrática media, dada por la ecuación (4.20).

$$\sigma_x = \sqrt{\frac{\min(F_x)}{2N_{bin}(N - N_{par})}} \quad (4.20)$$

donde F_x es la función objetivo y N , N_{bin} , N_{tri} y N_{par} son el número de componentes, las líneas de unión de los binarios, las líneas de unión de los terciarios y el número de parámetros del modelo, respectivamente.

Para el modelo de UNIQUAC se requiere además de los parámetros de interacción binaria, los parámetros r y q que son constantes relativas a la estructura molecular de los componentes puros y dependen del tamaño molecular y del área superficial externa.

En el modelo de NRTL utilizado en el presente trabajo se utilizó $\alpha_{ij}=0.2$ para todos los sistemas. Los valores de los parámetros estructurales r y q en el modelo de UNIQUAC de las sustancias estudiadas se muestran en el apéndice V.

En este capítulo se muestran los resultados de la correlación de los datos experimentales de la concentración de las diferentes líneas de equilibrio de los sistemas estudiados con los modelos de NRTL y UNIQUAC. Primero se presentan los resultados de la correlación para los sistemas ternarios, posteriormente para los sistemas cuaternarios. En este capítulo se presentan las gráficas de la correlación, en las tablas del apéndice V se presentan los resultados en forma numérica en fracción molar y en fracción masa, los parámetros de interacción binaria y las desviaciones en fracción molar obtenidas a partir del ajuste. Las gráficas se muestran en coordenadas triangulares, ya que es una forma adecuada de mostrar si la correlación es exacta.

IV.5 Correlación de sistemas ternarios utilizando el modelo de solución NRTL

La correlación de los datos experimentales de sistemas ternarios se llevó a cabo para los sistemas: metilciclohexano – tolueno – N-formilmorfolina a (298.15, 313.15 y 343.15) K . Los valores de las correlaciones se muestran en el Apéndice V.

Para la temperatura de 298.15 K se obtuvieron los siguientes resultados con el modelo de NRTL. En la figura 4.1 se muestra el diagrama comparativo entre los datos experimentales y los valores calculados con el modelo de NRTL.

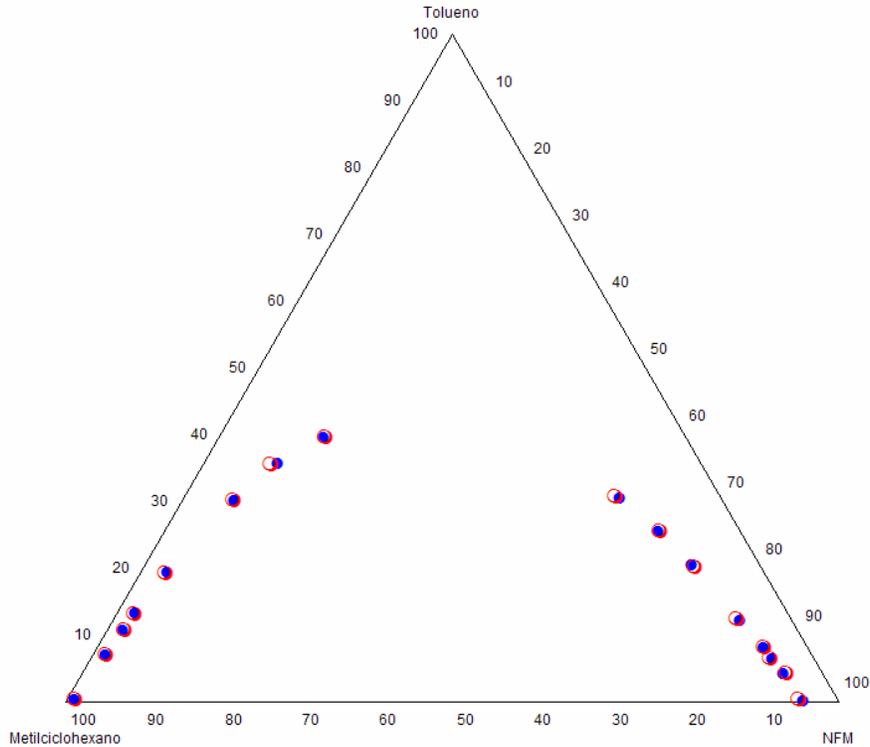


Figura 4.1 Diagrama comparativo de datos experimentales (○) y datos calculados, con el modelo NRTL (●) en fracciones molares, del sistema: metilciclohexano – tolueno – N-formilmorfolina, a 298.15 K.

En la figura 4.1 se observa una correlación adecuada de los datos experimentales. Se tiene una desviación cuadrática media de 0.33 % mol. En la Tabla V.1 del apéndice V se muestran los parámetros de interacción utilizados para la correlación del sistema: metilciclohexano – tolueno – N-formilmorfolina, a 298.15 K. En la Tabla V.2 del apéndice V se muestran los valores de las fracciones molares correlacionadas que se muestran en la figura 4.1. En la Tabla III.1 del apéndice III se muestran los valores experimentales en fracciones molares que se presentan en la figura 4.1.

Para la temperatura de 313.15 K se obtuvieron los siguientes resultados con el modelo de NRTL. En la figura 4.1 se muestra el diagrama comparativo entre los datos experimentales y los valores calculados con el modelo de NRTL.

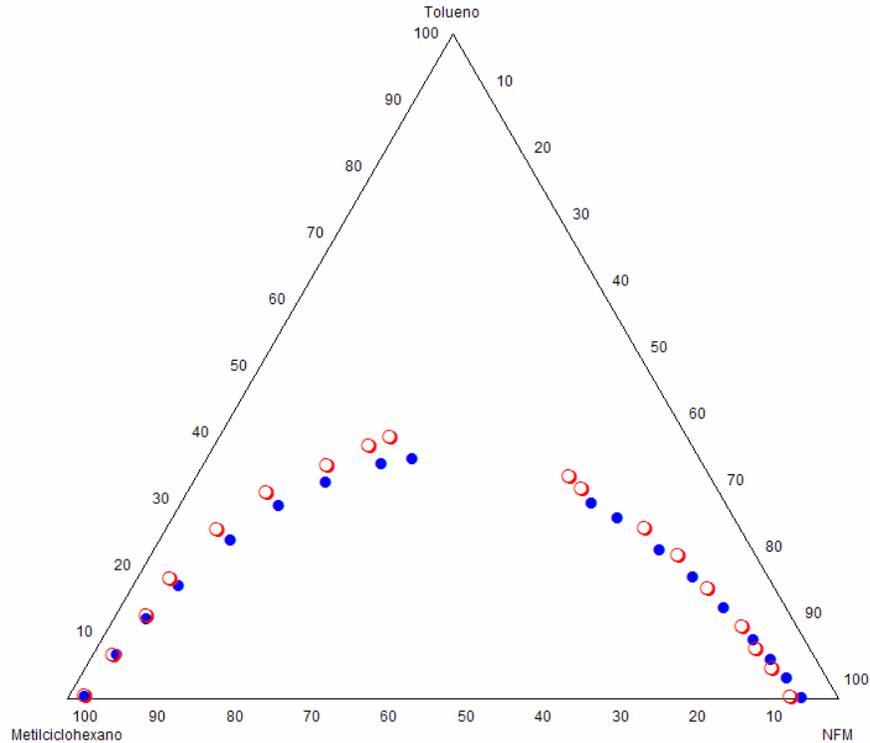


Figura 4.2 Diagrama comparativo de datos experimentales (○) y datos calculados, con el modelo NRTL (●) en fracciones molares, del sistema: metilciclohexano – tolueno – N-formilmorfolina, a 313.15 K.

En la figura 4.2 se observa una correlación adecuada de los datos experimentales. Se tiene una desviación cuadrática media de 0.7 % mol. En la Tabla V.4 del apéndice V se muestran los parámetros de interacción utilizados para la correlación del sistema: x_1 metilciclohexano – x_2 tolueno – x_3 N-formilmorfolina, a 313.15 K. En la Tabla V.5 del apéndice V se muestran los valores de las fracciones molares correlacionadas que se presentan en la figura 4.2. En la Tabla III.3 del apéndice III se muestran los valores experimentales en fracciones molares que se presentan en la figura 4.2.

Para la temperatura de 343.15 K se obtuvieron los siguientes resultados con el modelo de NRTL. En la figura 4.1 se muestra el diagrama comparativo entre los datos experimentales y los valores calculados con el modelo de NRTL.

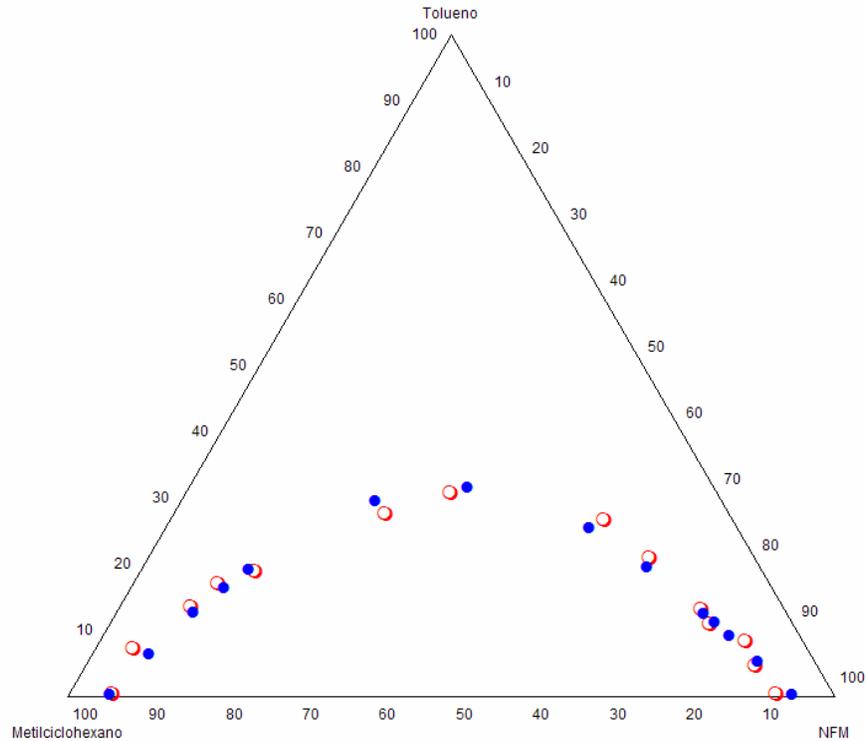


Figura 4.3 Diagrama comparativo de datos experimentales (○) y datos calculados, con el modelo NRTL (●) en fracciones molares, del sistema: metilciclohexano – tolueno – N-formilmorfolina, a 343.15 K.

En la figura 4.3 se observa una correlación adecuada de los datos experimentales. Se tiene una desviación cuadrática media de 1.34 % mol. En la Tabla V.7 del apéndice V se muestran los parámetros de interacción utilizados para la correlación del sistema: metilciclohexano – tolueno – N-formilmorfolina, a 343.15 K. En la Tabla V.8 del apéndice V se muestran los valores de las fracciones molares correlacionadas que se muestran en la figura 4.3. En la Tabla III.5 del apéndice III se muestran los valores experimentales en fracciones molares que se presentan en la figura 4.3.

Para los sistemas ternarios estudiados las desviaciones cuadráticas medias se encuentran por debajo de 1.34 % mol, lo que indica que el modelo de solución NRTL resulta adecuado para correlacionar datos de equilibrio líquido-líquido de los sistemas ternarios estudiados.

IV.6 Correlación de sistemas seudoternarios

La correlación de los datos experimentales de sistemas seudoternarios se llevó a cabo para los sistemas: metilciclohexano – tolueno – 50 % N-formilmorfolina- 50 % trietilenglicol, a (313.15 y 343.15) K. Los valores de la correlación se incluyen en el Apéndice V.

Para la temperatura de 313.15 K se obtuvieron los siguientes resultados con el modelo de NRTL. En la figura 4.1 se muestra el diagrama comparativo entre los datos experimentales y los valores calculados con el modelo de NRTL.

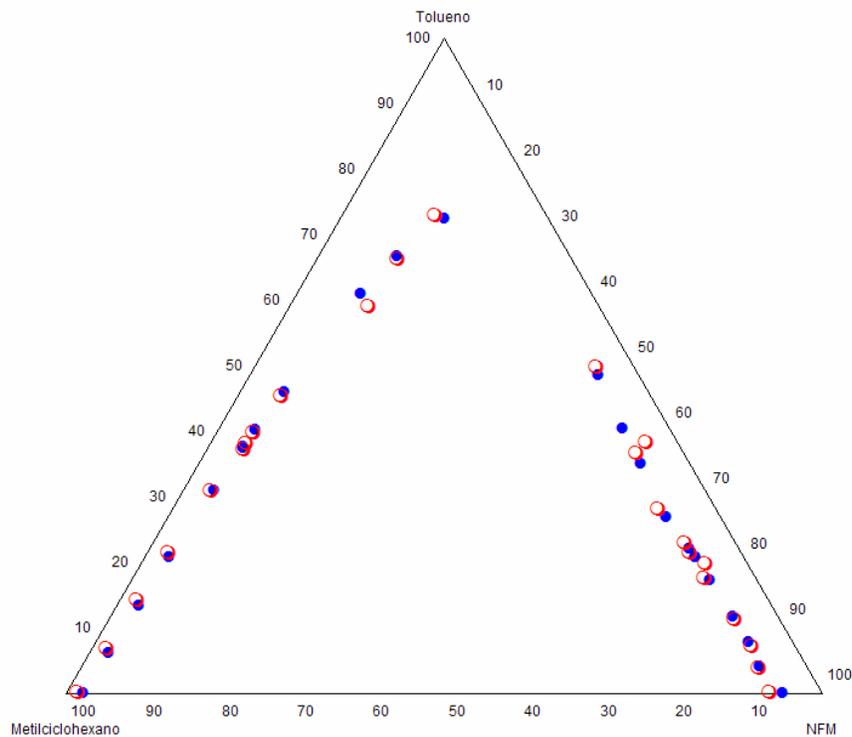


Figura 4.4 Diagrama comparativo de datos experimentales (o) y datos calculados, con el modelo NRTL (●) en fracciones molares, del sistema: metilciclohexano – tolueno – 50 % N-formilmorfolina – 50 % trietilenglicol, a 313.15 K.

En la figura 4.4 se observa una correlación adecuada de los datos experimentales. Se tiene una desviación cuadrática media de 1.34 % mol. En la Tabla V.10 del apéndice V se muestran los parámetros de interacción utilizados para la correlación del sistema:

metilciclohexano – tolueno – 50 % N-formilmorfolina- 50 % trietilenglicol, a 313.15 K. En la Tabla V.11 del apéndice V se muestran los valores de las fracciones molares correlacionadas que se muestran en la figura 4.4. En la Tabla III.8 del apéndice III se muestran los valores experimentales en fracciones molares que se presentan en la figura 4.4.

Para la temperatura de 313.15 K se obtuvieron los siguientes resultados con el modelo de NRTL. En la figura 4.5 se muestra el diagrama comparativo entre los datos experimentales y los valores calculados con el modelo de NRTL.

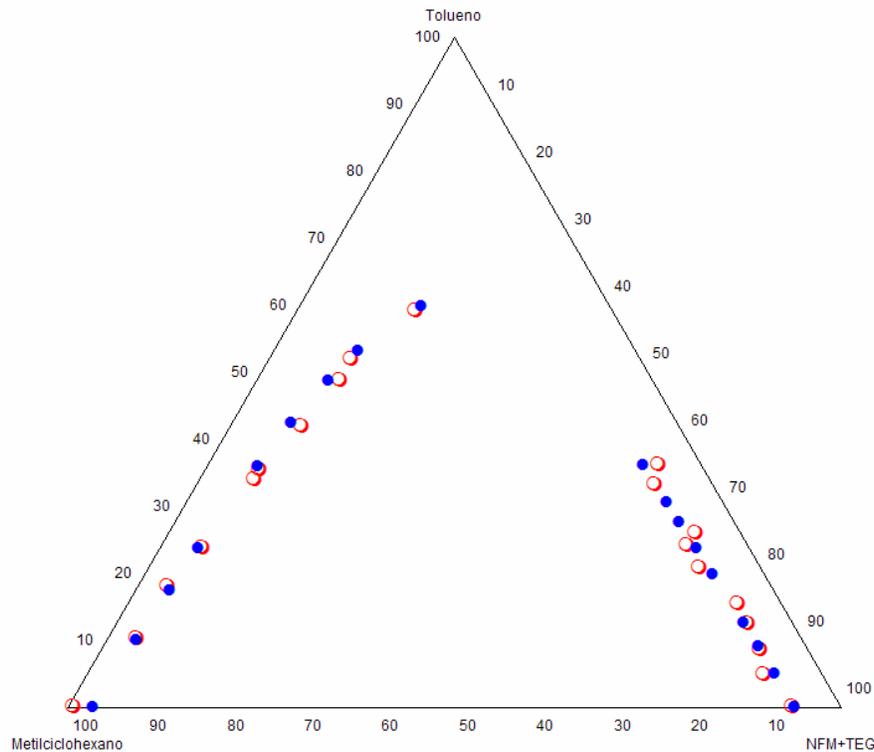


Figura 4.5 Diagrama comparativo de datos experimentales (○) y datos calculados, con el modelo NRTL (●) en fracciones molares, del sistema: metilciclohexano – tolueno – 50 % N-formilmorfolina – 50 % trietilenglicol, a 343.15 K.

En la figura 4.5 se observa una correlación adecuada de los datos experimentales. Se tiene una desviación cuadrática media de 1.34 % mol. En la Tabla V.13 del apéndice V se muestran los parámetros de interacción utilizados para la correlación del sistema: metilciclohexano – tolueno – 50 % N-formilmorfolina – 50 % trietilenglicol, a 343.15 K.

En la Tabla V.14 del apéndice V se muestran los valores de las fracciones molares correlacionadas que se muestran en la figura 4.5. En la Tabla III.10 del apéndice III se muestran los valores experimentales en fracciones molares que se presentan en la figura 4.5.

Además, se analizó el sistema: metilciclohexano – tolueno – 30 % N-formilmorfolina- 70 % trietilenglicol, a (313.15 y 343.15) K. Los valores de la correlación se incluyen en la Tabla IV.3.

Para la temperatura de 313.15 K se obtuvieron los siguientes resultados con el modelo de NRTL. En la figura 4.6 se muestra el diagrama comparativo entre los datos experimentales y los valores calculados con el modelo de NRTL.

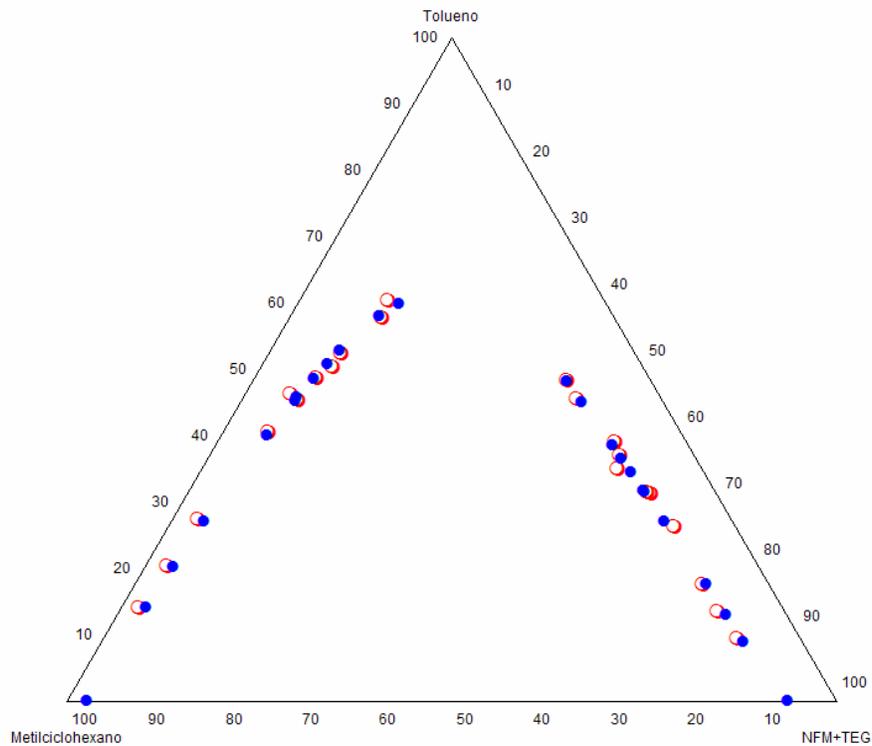


Figura 4.6 Diagrama comparativo de datos experimentales (○) y datos calculados, con el modelo NRTL (●) en fracciones molares, del sistema: metilciclohexano – tolueno – 30 % N-formilmorfolina – 70 % trietilenglicol, a 313.15 K.

En la figura 4.6 se observa una correlación adecuada de los datos experimentales. Se tiene una desviación cuadrática media de 0.57 % mol. En la Tabla V.16 del apéndice V se muestran los parámetros de interacción utilizados para la correlación del sistema: metilciclohexano – tolueno – 30 % N-formilmorfolina – 70 % trietilenglicol, a 313.15 K. En la Tabla V.17 del apéndice V se muestran los valores de las fracciones molares correlacionadas que se muestran en la figura 4.6. En la Tabla III.12 del apéndice III se muestran los valores experimentales en fracciones molares que se presentan en la figura 4.6.

Para la temperatura de 343.15 K se obtuvieron los siguientes resultados con el modelo de NRTL. En la figura 4.7 se muestra el diagrama comparativo entre los datos experimentales y los valores calculados con el modelo de NRTL.

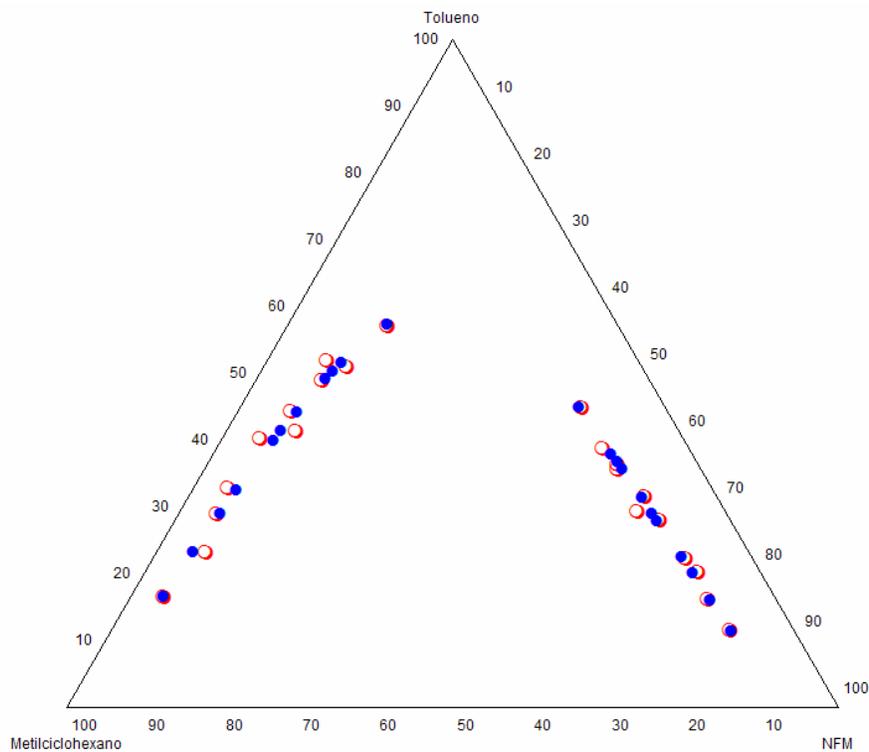


Figura 4.7 Diagrama comparativo de datos experimentales (○) y datos calculados, con el modelo NRTL (●) en fracciones molares, del sistema: metilciclohexano – tolueno – 30 % N-formilmorfolina – 70 % trietilenglicol a 343.15 K.

En la figura 4.7 se observa una correlación adecuada de los datos experimentales. Se tiene una desviación cuadrática media de 0.57 % mol. En la Tabla V.19 del apéndice V se muestran los parámetros de interacción utilizados para la correlación del sistema: metilciclohexano – tolueno – 30 % N-formilmorfolina – 70 % trietilenglicol, a 343.15 K. En la Tabla V.20 del apéndice V se muestran los valores de las fracciones molares correlacionadas que se muestran en la figura 4.7. En la Tabla III.14 del apéndice III se muestran los valores experimentales en fracciones molares que se presentan en la figura 4.7.

De acuerdo con los datos calculados para los sistemas seudoternarios estudiados se observa que las desviaciones cuadráticas medias están por debajo de 1.34 % mol en todos los casos, lo que indica que el modelo de solución NRTL resulta adecuado para correlacionar datos de equilibrio líquido-líquido de los sistemas seudoternarios estudiados.

IV.7 Correlación de sistemas ternarios utilizando el modelo de solución UNIQUAC

La correlación de los datos experimentales de sistemas ternarios y seudoternarios estudiados se realizó también utilizando el modelo de UNIQUAC, los resultados se muestran a continuación.

La correlación de datos experimentales se llevó a cabo para los sistemas: metilciclohexano – tolueno – N-formilmorfolina, a (298.15, 313.15 y 343.15) K.

Para la temperatura de 298.15 K se obtuvieron los siguientes resultados con el modelo de UNIQUAC. En la figura 4.8 se muestra el diagrama comparativo entre los datos experimentales y los valores calculados con el modelo de UNIQUAC.

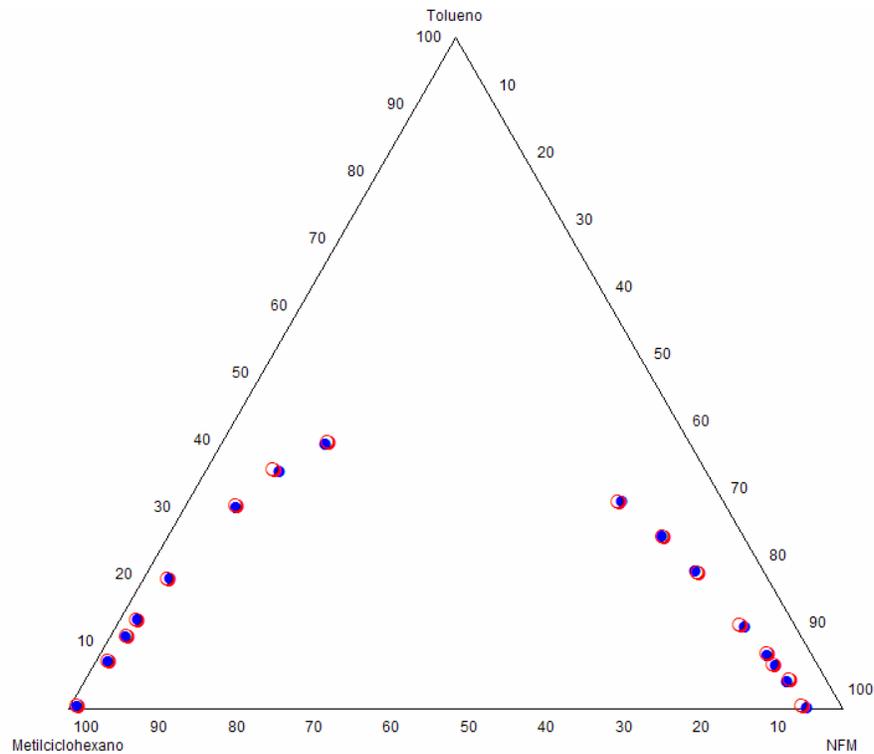


Figura 4.8 Diagrama comparativo de datos experimentales (○) y datos calculados, con el modelo UNIQUAC (●) en fracciones molares, del sistema: metilciclohexano – tolueno – N-formilmorfolina, a 298.15 K.

En la figura 4.8 se observa una correlación adecuada de los datos experimentales. Se tiene una desviación cuadrática media de 0.33 % mol. En la Tabla V.22 del apéndice V se muestran los parámetros de interacción utilizados para la correlación del sistema: metilciclohexano – tolueno – N-formilmorfolina, a 298.15 K. En la Tabla V.23 apéndice V se muestran los valores de las fracciones molares correlacionadas que se muestran en la figura 4.8. En la Tabla III.1 del apéndice III se muestran los valores experimentales en fracciones molares que se presentan en la figura 4.8.

En la figura 4.9 se muestra un diagrama comparativo entre los datos experimentales y los valores calculados utilizando el modelo de UNIQUAC para la temperatura de 313.15 K.

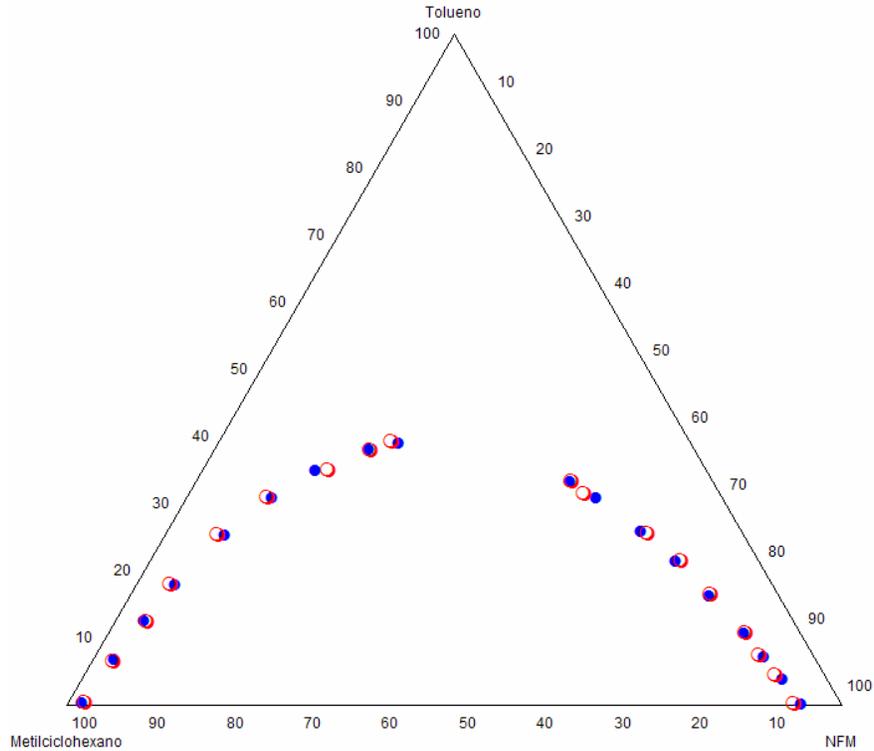


Figura 4.9 Diagrama comparativo de datos experimentales (○) y datos calculados, con el modelo UNIQUAC (●) en fracciones molares, del sistema: metilciclohexano – tolueno – N-formilmorfolina, a 313.15 K.

En la figura 4.9 se observa una correlación adecuada de los datos experimentales. Se tiene una desviación cuadrática media de 0.7 % mol. En la Tabla V.25 del apéndice V se muestran los parámetros de interacción utilizados para la correlación del sistema: metilciclohexano – tolueno – N-formilmorfolina, a 313.15 K. En la Tabla V.26 del apéndice V se muestran los valores de las fracciones molares correlacionadas que se muestran en la figura 4.9. En la Tabla III.3 del apéndice III se muestran los valores experimentales en fracciones molares que se presentan en la figura 4.9.

En la figura 4.10 se muestra un diagrama comparativo entre los datos experimentales y los valores calculados utilizando el modelo de UNIQUAC para la temperatura de 343.15 K.

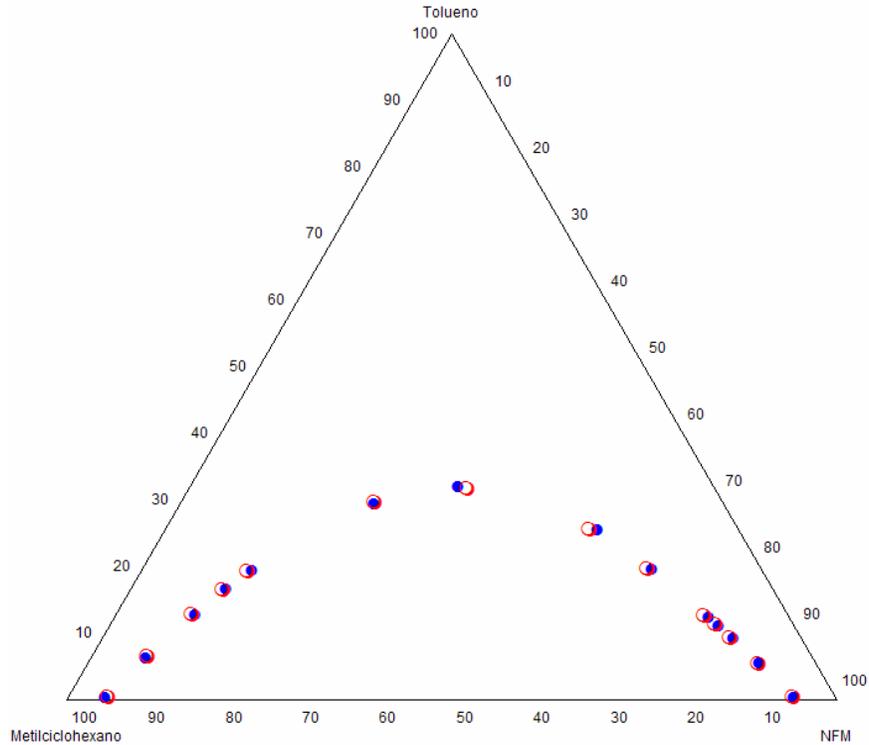


Figura 4.10 Diagrama comparativo de datos experimentales (○) y datos calculados, con el modelo UNIQUAC (●) en fracciones molares, del sistema: metilciclohexano – tolueno – N-formilmorfolina, a 343.15 K.

En la figura 4.10 se observa una correlación adecuada de los datos experimentales. Se tiene una desviación cuadrática media de 1.34 % mol. En la Tabla V.28 del apéndice V se muestran los parámetros de interacción utilizados para la correlación del sistema: metilciclohexano – tolueno – N-formilmorfolina, a 343.15 K. En la Tabla V.29 del apéndice V se muestran los valores de las fracciones molares correlacionadas que se muestran en la figura 4.10. En la Tabla III.5 del apéndice III se muestran los valores experimentales en fracciones molares que se presentan en la figura 4.10.

Las desviaciones cuadráticas medias de los tres diagramas ternarios de equilibrio de fases correlacionados son menores a 1.35 % mol. Por tanto, el modelo de solución UNIQUAC resulta adecuado para correlacionar datos de equilibrio líquido-líquido de los sistemas ternarios estudiados.

IV.8 Correlación de sistemas seudoternarios

La correlación de los datos experimentales de sistemas seudoternarios se llevó a cabo para los sistemas: metilciclohexano – tolueno – 50 % N-formilmorfolina- 50 % trietilenglicol, a (313.15 y 343.15) K.

Para la temperatura de 313.15 K se obtuvieron los siguientes resultados con el modelo de UNIQUAC. En la figura 4.11 se muestra el diagrama comparativo entre los datos experimentales y los valores calculados con el modelo de UNIQUAC.

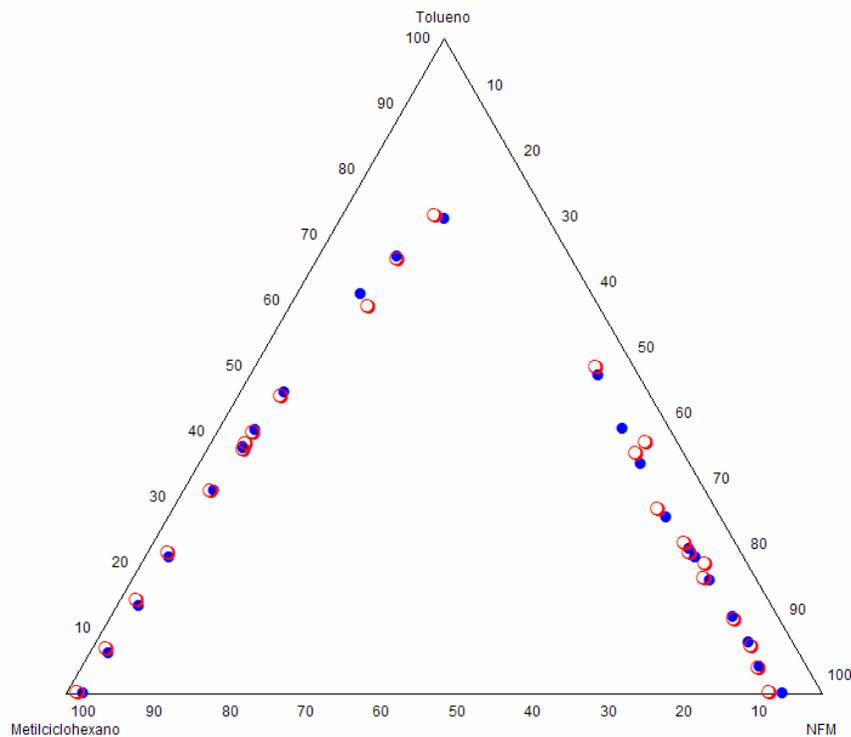


Figura 4.11 Diagrama comparativo de datos experimentales (○) y datos calculados, con el modelo UNIQUAC (●) en fracciones molares, del sistema: metilciclohexano – tolueno – 50 % N-formilmorfolina – 50 % trietilenglicol, a 313.15 K.

En la figura 4.11 se observa una correlación adecuada de los datos experimentales. Se tiene una desviación cuadrática media de 1.34 % mol. En la Tabla V.31 del apéndice V se muestran los parámetros de interacción utilizados para la correlación del sistema: metilciclohexano – tolueno – 50 % N-formilmorfolina – 50 % trietilenglicol, a 313.15 K.

En la Tabla V.32 del apéndice V se muestran los valores de las fracciones molares correlacionadas que se muestran en la figura 4.11. En la Tabla III.8 del apéndice III se muestran los valores experimentales en fracciones molares que se presentan en la figura 4.11.

En la figura 4.12 se muestra un diagrama comparativo entre los datos experimentales y los valores calculados utilizando el modelo de UNIQUAC para la temperatura de 343.15 K.

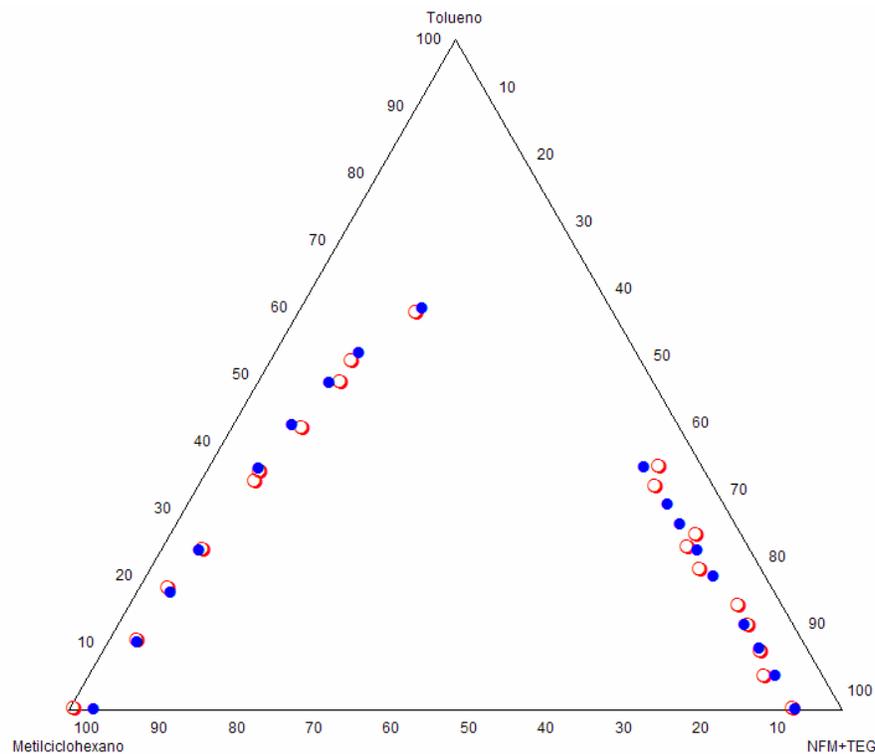


Figura 4.12 Diagrama comparativo de datos experimentales (o) y datos calculados, con el modelo UNIQUAC (●) del sistema: metilciclohexano – tolueno – 50 % N-formilmorfolina – 50 % trietilenglicol, a 343.15 K.

En la figura 4.12 se observa una correlación adecuada de los datos experimentales. Se tiene una desviación cuadrática media de 1.34 % mol. En la Tabla V.34 del apéndice V se muestran los parámetros de interacción utilizados para la correlación del sistema: metilciclohexano – tolueno – 50 % N-formilmorfolina – 50 % trietilenglicol, a 313.15 K. En la Tabla V.35 del apéndice V se muestran los valores de las fracciones molares

correlacionadas que se muestran en la figura 4.12. En la Tabla III.10 del apéndice III se muestran los valores experimentales en fracciones molares que se presentan en la figura 4.12.

Además, se analizó el sistema: metilciclohexano – tolueno – 30 % N-formilmorfolina – 70 % trietilenglicol, a (313.15 y 343.15) *K*.

Para la temperatura de 313.15 *K* se obtuvieron los siguientes resultados con el modelo de UNIQUAC. En la figura 4.13 se muestra el diagrama comparativo entre los datos experimentales y los valores calculados con el modelo de UNIQUAC.

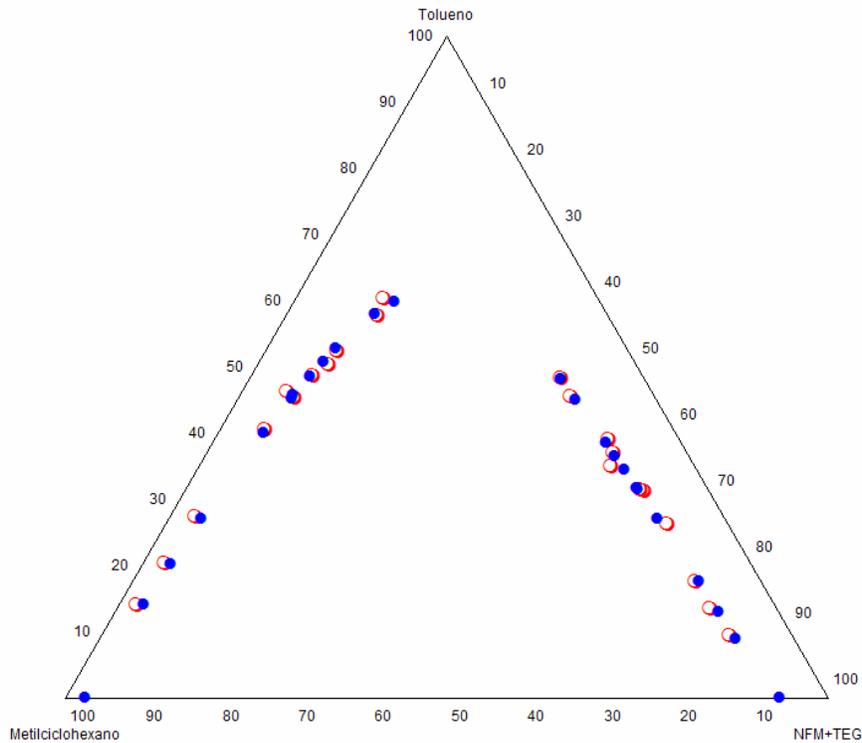


Figura 4.13 Diagrama comparativo de datos experimentales (○) y datos calculados, con el modelo UNIQUAC (●) en fracciones molares, del sistema: metilciclohexano – tolueno – 30 % N-formilmorfolina – 70 % trietilenglicol, a 313.15 *K*.

En la figura 4.13 se observa una correlación adecuada de los datos experimentales. Se tiene una desviación cuadrática media de 0.57 % mol. En la Tabla V.37 del apéndice V se muestran los parámetros de interacción binaria utilizados para la correlación del sistema:

metilciclohexano – tolueno – 30 % N-formilmorfolina – 70 % trietilenglicol, a 313.15 K. En la Tabla V.38 del apéndice V se muestran los valores de las fracciones molares correlacionadas que se muestran en la figura 4.13. En la Tabla III.12 del apéndice III se muestran los valores experimentales en fracciones molares que se presentan en la figura 4.13.

En la figura 4.14 se muestra un diagrama comparativo entre los datos experimentales y los valores calculados utilizando el modelo de UNIQUAC para la temperatura de 343.15 K.

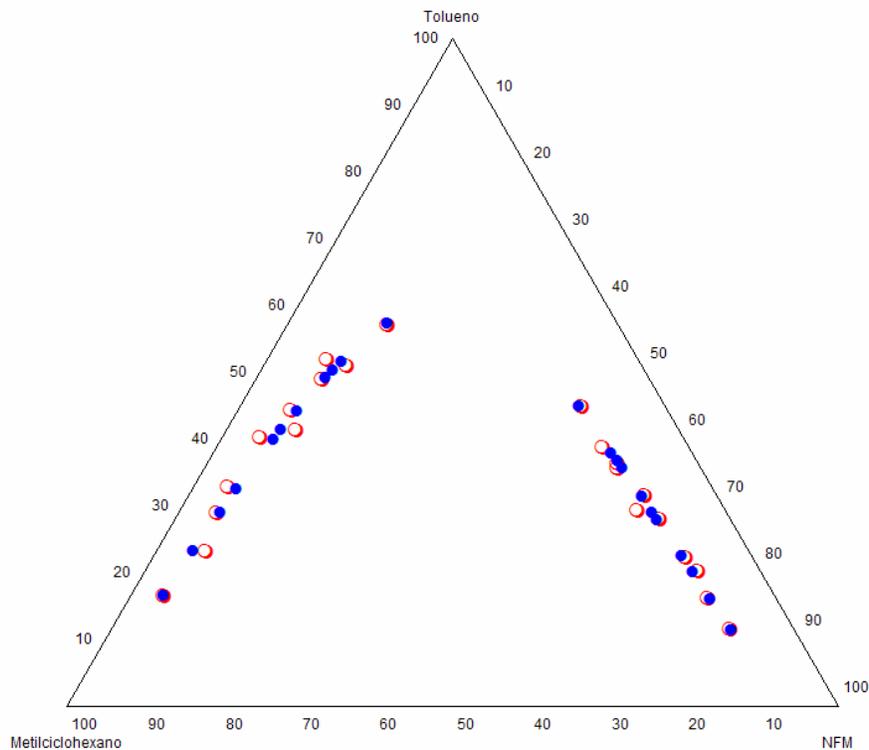


Figura 4.14 Diagrama comparativo de datos experimentales (○) y datos calculados, con el modelo UNIQUAC (●) en fracciones molares, del sistema: metilciclohexano – tolueno – 30 % N-formilmorfolina – 70 % trietilenglicol, a 343.15 K.

En la figura 4.14 se observa una correlación adecuada de los datos experimentales. Se tiene una desviación cuadrática media de 0.57 % mol. En la Tabla V.40 del apéndice V se muestran los parámetros de interacción utilizados para la correlación del sistema: metilciclohexano – tolueno – 30 % N-formilmorfolina – 70 % trietilenglicol, a 313.15 K.

En la Tabla V.41 del apéndice V se muestran los valores de las fracciones molares correlacionadas que se muestran en la figura 4.14. En la Tabla III.14 del apéndice III se muestran los valores experimentales en fracciones molares que se presentan en la figura 4.14.

De acuerdo con los datos correlacionados se observa que la desviación cuadrática media de los sistemas estudiados se encuentra por debajo de 1.34 % mol, lo que indica que el modelo de solución UNIQUAC resulta adecuado para correlacionar datos de equilibrio líquido-líquido de los sistemas seudoternarios estudiados.

Se observa que los dos modelos de solución NRTL y UNIQUAC son adecuados para la correlación de los datos de equilibrio de fases líquido-líquido de los sistemas ternarios y seudoternarios estudiados en el presente trabajo.

