

Evaluación de propiedades físicas de mezclas etanol-agua (II)

Evaluation of physical properties of ethanol-water mixtures (II)

*Osney Pérez Ones**, *Jorge Díaz Rodríguez*, *Lourdes Zumalacárregui*, *Oswaldo Gozá León*

Grupo de Análisis de Procesos, Facultad de Ingeniería Química, Instituto Superior Politécnico “José Antonio Echeverría” Ave 114 N.º 11901 e/ 119 y 127. Marianao, Ciudad Habana. Cuba

(Recibido el 23 de septiembre de 2009. Aceptado el 8 de enero de 2010)

Resumen

En este trabajo se presentan modelos para el cálculo de las propiedades físicas en mezclas de etanol-agua a presión atmosférica. Esto se logra a través de un método rápido y sencillo con un mínimo de información, partiendo de propiedades que se puedan medir experimentalmente. Los modelos para el cálculo de algunas propiedades como: densidad, viscosidad dinámica, conductividad térmica, tensión superficial e índice de refracción, así como modelos para la conversión entre composiciones, se obtienen a partir de ajustes estadísticos. Los valores de las propiedades obtenidas con estas ecuaciones son comparados con los reportados en la literatura, mostrándose la calidad del método.

-----*Palabras clave:* Alcohol etílico, etanol, densidad, viscosidad, conductividad

Abstract

In this work, models to estimate physicals properties for ethanol-water mixtures are shown for atmospheric pressure. This is achieved through a quick and simple method with a minimum of information, starting with measurable properties. Models to estimate density, dynamic viscosity, thermal conductivity, surface tension and refractive index are based on statistic methods. Obtained values are compared with different literature sources showing, satisfactory adjustments.

----- *Keywords:* Ethyl alcohol, ethanol, density, viscosity, conductivity

* Autor de correspondencia: teléfono: + 53 + 7 + 266 33 96, correo electrónico: osney@quimica.cujae.edu.cu.(O. Perez)

Introducción

Todos los procesos químicos requieren de la disponibilidad de propiedades físicas y termodinámicas. En dependencia de la operación unitaria involucrada, las propiedades físicas y termodinámicas que se requieren son diferentes [1]. Aunque las leyes de la Termodinámica son generales, ellas suministran relaciones, no modelos. Por lo que, cuando se habla de calcular propiedades físicas se está haciendo referencia a resultados obtenidos usando modelos termodinámicos. La calidad final de los resultados en la modelación de un proceso, independientemente del grado de sofisticación de las ecuaciones del modelo, depende de la calidad de las predicciones suministradas por el modelo termodinámico [2]. En la industria competitiva actual, los procesos son modelados y optimizados usando herramientas de simulación. Una de las razones fundamentales por la cual los simuladores de procesos son exitosos, es su habilidad para modelar con precisión el comportamiento termodinámico de las mezclas de fluidos con muy poca información de entrada por parte del usuario [3]. La mayoría de los simuladores tienen una gran base de datos de componentes y una amplia variedad de modelos termodinámicos y correlaciones estadísticas incluidos en el paquete de propiedades físicas disponibles. Es por ello que el paso más propenso a errores en una simulación es la selección del modelo correcto y los datos de propiedades físicas [1]. Dado que la información relacionada con la estimación de propiedades de mezclas etanol-agua se encuentra dispersa en la literatura y que en todos los casos no se brinda la calidad del ajuste ni el error de estimación de las propiedades calculadas, en este trabajo se presentan los modelos obtenidos estadísticamente utilizando STATGRAPHICS Centurión XV. Dado que en la literatura se reportan resultados de composición unas veces en % máxicos y en otras como % volumétricos, se incluyen modelos que permiten la conversión de una en otra forma de expresar la composición. Estos modelos forman parte del paquete de propiedades del simulador de procesos para fábricas de azúcar y etanol (STA).

Modelos

Densidad

Para la densidad del etanol en fase líquida en el intervalo de temperatura entre 273 y 373 K (0 y 100 °C) [4] se obtuvo el modelo siguiente:

$$\rho_{1L} = 805,951 - 0,7767 T - 0,0013 T^2 \quad (1)$$

Para determinar la densidad del agua en fase líquida en el mismo intervalo de temperatura [5] se ajustó el siguiente modelo:

$$\rho_{2L} = 999,888 + 0,0375 T - 0,0065T^2 + 2 * 10^{-5} T^3 \quad (2)$$

Para determinar la densidad de la mezcla etanol-agua en fase líquida en función de la composición y la temperatura se pueden utilizar las siguientes expresiones:

Para valores entre 0 y 80 °C

Se ajustó el siguiente modelo [6]:

$$\rho_{mezL} = 1.003,98 - 0,3524 T - 96,7916 x_1^2 - 100,0610 x_1 - 1,3996 T x_1 + 0,8585 x_1^2 T \quad (3)$$

Para valores entre 80 y 100 °C

Se emplea la ley de Amagat [4]

$$\rho_{mezL} = \frac{46,069 x_{1mol} + 18,015 (1 - x_{1mol})}{\frac{46,069 x_{1mol}}{\rho_{1L}} + \frac{18,015 (1 - x_{1mol})}{\rho_{2L}}} \quad (4)$$

En fase vapor la densidad de los componentes puros se determina a partir de la ley de los gases ideales [4]. Para el etanol queda:

$$\rho_{1V} = \frac{P}{0,1804 T + 49,2702} \quad (5)$$

Para el agua:

$$\rho_{2V} = \frac{P}{0,4615 T + 126,0676} \quad (6)$$

Para el cálculo de la densidad de la mezcla en fase vapor puede usarse la regla aditiva:

$$\rho_{mezV} = \sum y_i \cdot \rho_{iV} \quad (7)$$

Viscosidad Dinámica

Para determinar la dependencia de la viscosidad del etanol en fase líquida [4] en función de la temperatura se pueden utilizar las siguientes expresiones:

Para valores entre 0 y 30 °C

$$\mu_{1L} = 1,747 - 0,0256 T \quad (8)$$

Para valores entre 30 y 100 °C

$$\mu_{1L} = 1,5539 - 2,1517 * 10^{-2} T + 9,2143 * 10^{-5} T^2 \quad (9)$$

En el caso del agua, para determinar su viscosidad en fase líquida [5] en función de la temperatura se emplea el siguiente modelo para valores entre 273 y 373 K (0 y 100 °C):

$$\mu_{2L} = (0,6919 + 0,0153 T)^{\frac{-1}{0,6307}} \quad (10)$$

Los estudios teóricos de la viscosidad de mezclas generalmente son complicados. Existen varios modelos empíricos propuestos con este fin. En raros casos, la viscosidad de las mezclas puede ser obtenida por la suma de las viscosidades de los componentes puros [7].

Para la estimación de la viscosidad dinámica de la mezcla etanol-agua en función de la composición y la temperatura en fase líquida, se ajustaron los siguientes modelos, válidos entre 273 y 343 K (0 y 70 °C) [6]:

Para valores de temperatura de 0-25 °C

$$\begin{aligned} \mu_{mezL} = & 1,5893 - 0,1063 T - 32,7635 x_1^2 \\ & + 22,1623 x_1 - 0,3482 T x_1 + 0,3977 x_1^2 \\ & T + 10,7086 x_1^3 + 0,0017 T^2 \end{aligned} \quad (11)$$

Para valores de temperatura de 25-70 °C

$$\begin{aligned} \mu_{mezL} = & 1,9405 - 0,0469 T + 6,1067 x_1 \\ & + 0,0004 T^2 - 5,9790 x_1^2 \\ & - 0,0729 T x_1 + 0,0725 T x_1^2 \end{aligned} \quad (12)$$

Para valores de temperatura de 70-100 °C

Se utiliza la regla de mezclado desarrollada por Kendall y Monroe [4]:

$$\mu_{mezL} = \left[x_{1mol} \mu_{1L}^{1/3} + (1 - x_{1mol}) \mu_{2L}^{1/3} \right]^3 \quad (13)$$

Para calcular la viscosidad de los componentes puros en fase vapor, se utiliza en el caso del etanol, el método de Stiel y Thodos [4]:

$$\mu_{1V} = 36,9103 N \quad (14)$$

Donde el parámetro N se calcula en dependencia del valor que toma la temperatura reducida:

Para valores de temperatura reducida $\leq 1,5$

$$N = 0,00034 (0,001946 T + 0,5315)^{0,94} \quad (15)$$

Para valores de temperatura reducida $> 1,5$

$$N = 0,0001778 [0,0089119 T - 1,1385]^{0,625} \quad (16)$$

Para el agua se emplea el método de Reichenberg [4]:

$$\mu_{2V} = \left[\frac{7,6881 * 10^{-3} + 2,8146 * 10^{-5} T}{1,0878 * 10^3 + 0,7563 T + 8,5965 * 10^{-4} T^2} \right] \quad (17)$$

En el caso de la viscosidad de la mezcla en la fase vapor se utiliza el método de Bromley y Wilkeis [4], válido a bajas presiones y temperatura reducida por debajo de 0,6:

$$\mu_{mezV} = \left[\frac{\mu_{1V}}{1 + \left[0,1875 + 0,1172 \left(\frac{\mu_{1V}}{\mu_{2V}} \right) \left(\frac{1-y_{1mol}}{y_{1mol}} \right) \right]} + \frac{\mu_{2V}}{1 + \left[0,2998 + 0,4794 \left(\frac{\mu_{2V}}{\mu_{1V}} \right) \left(\frac{y_{1mol}}{1-y_{1mol}} \right) \right]} \right] \quad (18)$$

Conductividad térmica

Las ecuaciones que se muestran a continuación permiten determinar la conductividad térmica del etanol en fase líquida en función de la temperatura para diferentes intervalos [4]:

Para valores entre 0 y 40 °C

$$k_{1L} = 0,1772 - 0,0002 T \quad (19)$$

Para valores entre 40 y 100 °C

$$k_{1L} = 0,1794 - 0,0003 T \quad (20)$$

Para determinar la conductividad térmica del agua en función de la temperatura se pueden utilizar las siguientes expresiones:

Para valores entre 0 y 90 °C

Se ajustó la ecuación [5]:

$$k_{2L} = 0,5513 + 0,0026 T - 1,29 * 10^{-5} T^2 \quad (21)$$

Para valores entre 90 y 100 °C

Se emplea el método de Missenard [4], válido a presiones inferiores a 3,5 MPa:

$$k_{2L} = 0,0926 + (0,2804 - 0,0007 T)^{2/3} \quad (22)$$

Para obtener la ecuación de la conductividad térmica de la mezcla etanol-agua en función de la composición y la temperatura en fase líquida, se ajustaron debido a las características de la curva, dos modelos. Se utilizaron los datos reportados en la literatura [6], para valores entre 273 y 353 K (0 y 80 °C):

Para valores de temperatura entre 0-40 °C

$$k_{mezL} = 0,5524 + 0,0025 T - 0,5531 x_1 - 0,0018 T x_1 + 0,1822 x_1^2 \quad (23)$$

Para valores de temperatura entre 40-80 °C

$$k_{mezL} = 0,5940 + 0,0011 T - 0,5012 x_1 + 0,0326 x_1^2 \quad (24)$$

Para valores de temperatura entre 80-100 °C

Se sugiere el método de Li [4], válido a presiones menores que 3,5 MPa:

$$k_{mezL} = \phi_1^2 k_{1L} + 2 \phi_1 \phi_2 \left(\frac{2}{\left(\frac{1}{k_{1L}} \right) + \left(\frac{1}{k_{2L}} \right)} \right) + \phi_2^2 k_{2L} \quad (25)$$

Donde el parámetro Φ_{ij} se determina a partir de las siguientes expresiones:

$$\phi_1 = \left(1 + \frac{2,55726 x_{1mol} \rho_{2L}}{(1 - x_{1mol}) \rho_{1L}} \right) \quad (26)$$

$$\phi_2 = \left(1 + \frac{0,39104 (1 - x_{1mol}) \rho_{1L}}{x_{1mol} \rho_{2L}} \right) \quad (27)$$

Para la determinación de la conductividad térmica del etanol en fase vapor se utiliza la ecuación de Misic y Thodos [4], válida a presiones inferiores a 3,5 MPa:

$$k_{1V} = 0,8014 * 10^{-7} C_{p1G} (1,87985 + 0,09494 T^{2/3}) \quad (28)$$

Para el agua se emplea la expresión de Stiel y Thodos [4] para moléculas no lineales:

$$k_{2V} = \frac{\mu_{2V}}{18,015} (1,15 C_{p2G} + 7.341,7) \quad (29)$$

En el caso de la conductividad térmica de la mezcla en fase vapor, se utiliza la relación de

Wassiljewa [4], válida para presiones igual a la atmosférica o menores que ella:

$$k_{mezV} = \frac{y_{1mol} k_{1V}}{y_{1mol} + (1 - y_{1mol}) A_{12}} + \frac{(1 - y_{1mol}) k_{2V}}{y_{1mol} A_{21} + (1 - y_{1mol})} \quad (30)$$

Los parámetros de interacción binarios se determinan por el método de Lindsay y Bromley:

$$A_{12} = \left[1 + \left[0,4945 \left(\frac{\mu_{1V}}{\mu_{2V}} \right) \left(\frac{T + 800,325}{T + 832,875} \right) \right]^{0,5} \right]^2 \quad (31)$$

$$A_{21} = \left[1 + \left[2,0222 \left(\frac{\mu_{2V}}{\mu_{1V}} \right) \left(\frac{T + 832,875}{T + 800,325} \right) \right]^{0,5} \right]^2 \quad (32)$$

Conversión entre composiciones

Para determinar las ecuaciones de conversión entre % másico (⁰INPM) y %volumétrico (⁰GL) y viceversa, se ajustaron los siguientes modelos de acuerdo a los datos brindados por la literatura [6].

Para %volumétrico entre 0-73,34

$$\%m\acute{a}s = -0,0356 + 0,8048 \%vol + 1,78 * 10^{-5} \%vol^3 \quad (33)$$

Para %volumétrico entre 73,34-86,31

$$\%m\acute{a}s = 15,3450 + 0,2955 \%vol + 0,0054 \%vol^2 \quad (34)$$

Para %volumétrico entre 86,31-92,53

$$\%m\acute{a}s = 43,5085 - 0,3596 \%vol + 0,0092 \%vol^2 \quad (35)$$

Para %volumétrico entre 92,53-100

$$\%m\acute{a}s = -807,2410 + 27,1097 \%vol - 0,2865 \%vol^2 + 0,0011 \%vol^3 \quad (36)$$

Para %m\acute{a}sico entre 0-39

$$\%vol = 0,0558 + 1,24 \%m\acute{a}s - 3,61 * 10^{-5} \%m\acute{a}s^3 \quad (37)$$

Para %m\acute{a}sico entre 39-78

$$\%vol = -0,7950 + 1,3270 \%m\acute{a}s - 0,0031 \%m\acute{a}s^2 - 1,2 * 10^{-6} \%m\acute{a}s^3 \quad (38)$$

Para %m\acute{a}sico entre 78-100

$$\%vol = 27,5395 + 0,2576 \%m\acute{a}s + 0,0105 \%m\acute{a}s^2 - 5,82 * 10^{-5} \%m\acute{a}s^3 \quad (39)$$

Tensión superficial

Para evaluar la tensión superficial del etanol en función de la temperatura se puede utilizar el siguiente modelo, válido entre 273 y 333 K (0 y 60 °C), ajustado de acuerdo a los datos brindados por la literatura [5]:

$$\sigma_1 = 0,0244 * e^{-0,0046T} \quad (40)$$

Para determinar la tensión superficial del agua en función de la temperatura [5] se ajustó la ecuación, válida entre 273 y 403 K (0 y 130 °C), que se muestra a continuación:

$$\sigma_2 = 0,0761 - 0,1754 * 10^{-3} T \quad (41)$$

En el caso de las mezclas puede usarse la regla aditiva para el cálculo de la tensión superficial:

$$\sigma_{mez} = \sum x_{imol} \sigma_i \quad (42)$$

Índice de refracción

Para la determinación de la composición de etanol en la mezcla, a través de la medición del índice refracción a 293 K (20°C), se ajustaron varios modelos para los datos reportados en la literatura [8]:

Para n entre 1,3330 - 1,3377

$$x_1 = -618,12 + 909,85 n - 334,69 n^2 \quad (43)$$

Para n entre 1,3377 - 1,3511

$$x_1 = 38,27 - 70,37 n + 31,26 n^2 \quad (44)$$

Para n entre 1,3511 - 1,3583

$$x_1 = 1.188,88 - 1.774,02 n + 661,89 n^2 \quad (45)$$

Para n entre 1,3583 - 1,3634

$$x_1 = 4.538,31 - 6.703,75 n + 2.475,80 n^2 \quad (46)$$

Para n entre 1,3634 - 1,3658

$$x_1 = \frac{0,9937 - 0,7254 n}{1 + 0,3267 n - 0,7733 n^2} \quad (47)$$

Para n entre 1,3646 - 1,3658 y $x_1 > 0,8$

$$x_1 = \frac{3,4311 - 2,5107 n}{1 + 0,9773 n - 1,2503 n^2} \quad (48)$$

Resultados y discusión

En la tabla 1 se presentan algunos de los parámetros estadísticos de los modelos descritos anteriormente. En todos los casos el valor de probabilidad fue igual a cero para $F_c < F_{calculadas}$. Los coeficientes que se reportan en cada modelo

resultaron significativos para más de 95% de confianza utilizando para ello el criterio de la t de Student.

La confiabilidad de los modelos ajustados puede observarse en la Tabla 2.

Para los modelos representados por las ecuaciones 4-7, 13-18, 25-32 y 42 no se reportan valores ya que estas ecuaciones no fueron obtenidas por los autores.

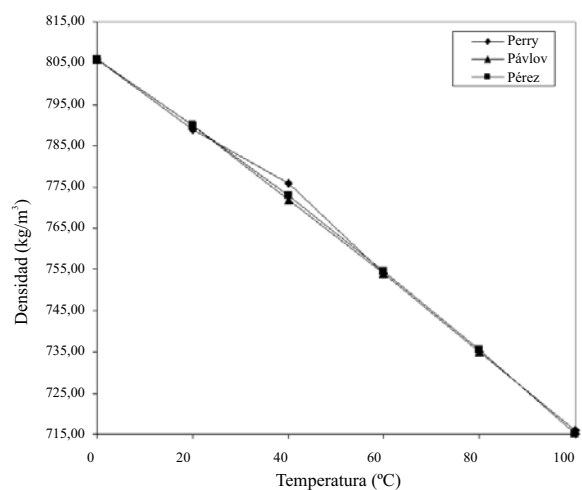
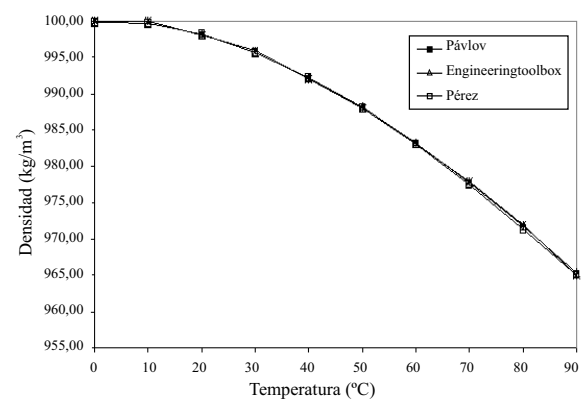
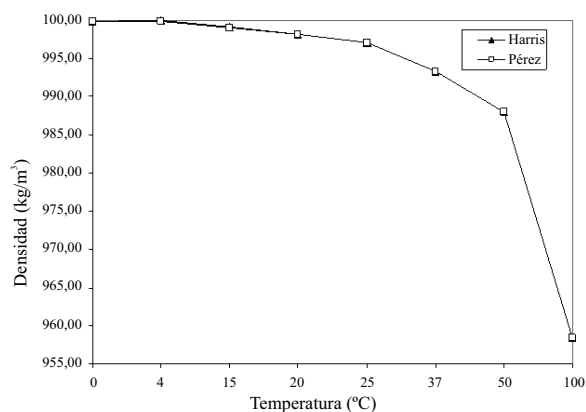
El modelo ajustado (Ec. 1) representado en la figura 1 se muestra la densidad de etanol en fase líquida que fue comparada con los datos de la literatura, Perry [4] y Pávlov [5], dando un error promedio de 0,13% y 0,06%, respectivamente. El modelo ajustado (Ec. 2) para la densidad de agua en fase líquida (Figura 2) fue comparado con los datos de la literatura, Pávlov [5] y Engineeringtoolbox [9], dando un error promedio de 0,02% y 0,01%. También se comparó con los valores reportados por Harris [10] (Figura 3), obteniéndose como error promedio 0%. Los resultados obtenidos para la densidad de la mezcla en fase líquida, entre 273 y 353 K, (Ec. 3) fueron comparados con Stabnikov y otros [6], Windisch [11], Perry [4] y Konchady [12], dando errores promedios de 0,18%, 4,03%, 3,59% y 4,72%, respectivamente. Se puede apreciar en la figura 4, que el modelo propuesto a bajas concentraciones de etanol predice un buen comportamiento, todo lo contrario cuando aumentan las concentraciones, ya que se nota un alejamiento en comparación con otros autores. Con la aplicación de la ecuación de Amagat (Ec. 4) se obtiene como error promedio 1,81%. Los resultados que se obtienen para la densidad del agua en fase vapor (Ec. 6), se compararon a presión atmosférica en el intervalo entre 100-400 °C, con los obtenidos a partir de las funciones para el cálculo de propiedades termodinámicas y de transporte del agua y el vapor de la norma industrial IAPWS-IF97, obteniéndose como error promedio 0,49%.

Tabla 1 Parámetros estadísticos de los modelo

<i>Propiedad</i>	<i>Ecuación</i>	<i>Parámetro</i>		
		<i>Coefficiente de correlación ajustado por grados de libertad (%)</i>	<i>Error estándar de estimación</i>	<i>Estadígrafo Durbin-Watson</i>
$\rho_{1L} = f(T)$	1	99,81	1,3002	2,4250 (P=0,0489)
$\rho_{2L} = f(T)$	2	99,99	0,0553	1,9770 (P=0,0600)
$\rho_{mezL} = f(x_1, T)$	3	99,98	1,2866	1,6697 (P=0,0728)
$\mu_{1L} = f(T)$	8	98,85	0,0359	2,0434 (P=0,1042)
	9	99,83	0,0099	1,4049 (P=0,0122)
$\mu_{2L} = f(T)$	10	99,99	0,0019	1,4994
	11	98,01	0,1461	1,9115 (P=0,1132)
$\mu_{mezL} = f(x_1, T)$	12	98,97	0,0361	1,8042 (P=0,0838)
	19	98,91	0,0004	1,9000 (P=0,1480)
$k_{1L} = f(T)$	20	99,73	0,0003	1,5952 (P=0,1101)
	21	99,96	0,0008	1,4282 (P=0,0231)
$k_{mezL} = f(x_1, T)$	23	99,46	0,0102	1,7135 (P=0,0769)
	24	99,50	0,0103	1,9963 (P=0,3606)
	33	99,99	0,0304	2,1020 (P=0,2486)
$\%mas = f(\%vol)$	34	99,99	0,0027	2,2800 (P=0,1095)
	35	99,99	0,0041	2,1929 (P=0,0836)
	36	99,99	0,0050	2,3202 (P=0,0287)
$\%vol = f(\%mas)$	37	99,99	0,0492	1,9454 (P=0,3006)
	38	100	0,0034	1,9512 (P=0,2454)
	39	100	0,0035	1,5286 (P=0,0250)
$\sigma_1 = f(T)$	40	96,88	0,0005	2,7450
	41	99,62	0,0006	1,4010 (P=0,0324)
$\sigma_2 = f(T)$	43	99,97	0,0004	1,8506 (P=0,1657)
	44	99,99	0,0006	1,5886 (P=0,0678)
	45	99,97	0,0009	1,9570 (P=0,1064)
$x_1 = f(n)$	46	99,93	0,0016	1,7117 (P=0,0734)
	47	98,88	0,0074	1,9679
	48	98,98	0,0049	1,0623

Tabla 2 Confiabilidad de los modelos

<i>Propiedad</i>	<i>Ecuación</i>	<i>Error relativo promedio (%)</i>
$\rho_{1L} = f(T)$	1	0,13
$\rho_{2L} = f(T)$	2	0
$\rho_{mezL} = f(x_1, T)$	3	0,18
	8	1,73
$\mu_{1L} = f(T)$	9	1,42
	Total	1,50
$\mu_{2L} = f(T)$	10	0,30
	11	5,28
$\mu_{mezL} = f(x_1, T)$	12	3,57
	Total	4,14
	19	0,12
$k_{1L} = f(T)$	20	0,14
	Total	0,13
$k_{2L} = f(T)$	21	0,10
	23	3,59
$k_{mezL} = f(x_1, T)$	24	5,70
	Total	4,76
	33	0,11
	34	0,01
$\%mas = f$ (%vol)	35	0,01
	36	0
	Total	0,08
	37	0,22
$\%vol = f$ (%mas)	38	0
	39	0
	Total	0,09
$\sigma_1 = f(T)$	40	1,22
$\sigma_2 = f(T)$	41	0,67
	43	1,15
	44	0,35
	45	1,88
$x_1 = f(n)$	46	0,73
	47	0,72
	48	0,44
	Total	0,79

**Figura 1** Densidad del etanol en fase líquida**Figura 2** Densidad del agua en fase líquida**Figura 3** Densidad del agua en fase líquida (Harris [10])

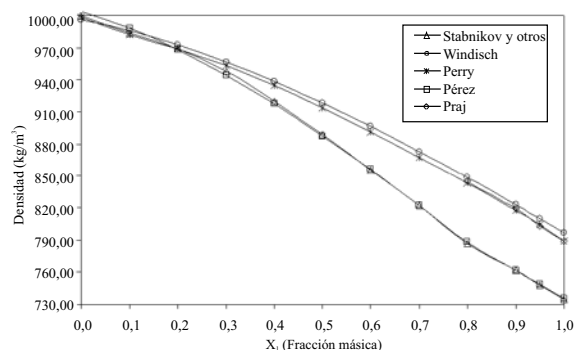


Figura 4 Densidad de la mezcla etanol-agua

Los modelos obtenidos para evaluar la viscosidad dinámica del etanol en fase líquida (Ec. 8 y 9) fueron comparados con los de Perry [4], dando un error promedio de 1,50%; esto se puede observar en la figura 5. La comparación del modelo obtenido para el agua (Ec. 10) reflejado en la figura 6, con los resultados que brindan Pávlov [5], Lide [13] y Andrade [14], arrojan un error promedio de 0,30%, 0,33% y 1,92%. En las figuras 5 y 6, se aprecia cómo la viscosidad de ambas sustancias en fase líquida disminuye exponencialmente con la temperatura. Esto concuerda con el comportamiento observado en la mayor parte de los líquidos puros [14]. Los modelos obtenidos (Ec. 11 y 12), se compararon con los resultados de Stabnikov y otros [6] y los de Belda y colaboradores [15], dando como error promedio 4,14% y 4,52%, respectivamente; para la Ec. 13 se reporta [4] que presenta un error entre 5-6%. Se puede observar en la figura 7 que el mayor alejamiento está en el intervalo de composición de 0,2 a 0,7 en ambos casos. Para los modelos que permiten calcular la viscosidad de los componentes puros en fase vapor, se reporta [4] que, en el caso de la Ec. 14, el error es inferior al 3% y la Ec. 17 presenta un error cercano al 5%. En el caso de la viscosidad de la mezcla en la fase vapor (Ec. 18), presenta un 3% de error [4].

Los modelos obtenidos (Ec. 19 y 20), que permiten evaluar la conductividad térmica del etanol en fase líquida (Figura 8), fueron comparados con los de Perry [4], dando un error promedio de 0,13%. En el caso del agua, el modelo obtenido

(Ec. 21) fue comparado con los resultados del Pávlov [5], presentando un error promedio de 0,10%. Estos resultados pueden apreciarse en la figura 9. Para la Ec. 22 se informa [4] un error inferior al 8%. Los modelos obtenidos para la mezcla etanol-agua en fase líquida (Ec. 23 y 24), se compararon con los datos de Stabnikov y otros [6], dando como error promedio 4,76%; se observa en la figura 10 que hay un pequeño alejamiento en el intervalo de composición de 0,4 a 0,95. El comportamiento de la conductividad térmica de la mezcla es similar al obtenido por Jowitt y colaboradores [16]. Para la Ec. 25 se informa [4] que presenta un error entre 4-6%. En el caso de los modelos que permiten, calcular la conductividad térmica de los componentes puros en fase vapor (Ec. 28 y 29), se reportan [4] errores inferiores al 5% y entre 8-10%, respectivamente. Para la conductividad térmica de la mezcla en fase vapor (Ec. 30), el error está entre 4-5%.

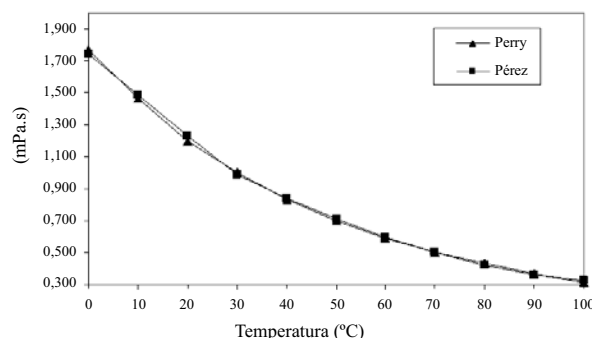


Figura 5 Viscosidad dinámica del etanol

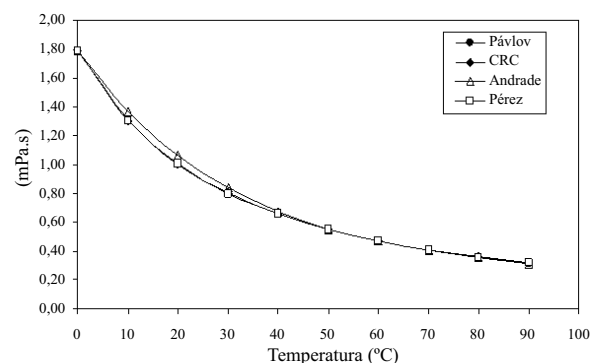


Figura 6 Viscosidad dinámica del agua

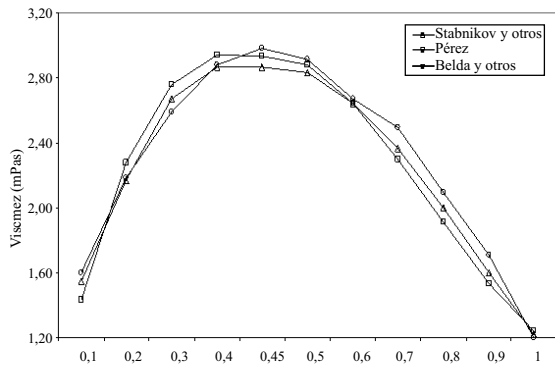


Figura 7 Viscosidad dinámica de la mezcla etanol-agua a 0 (°C)

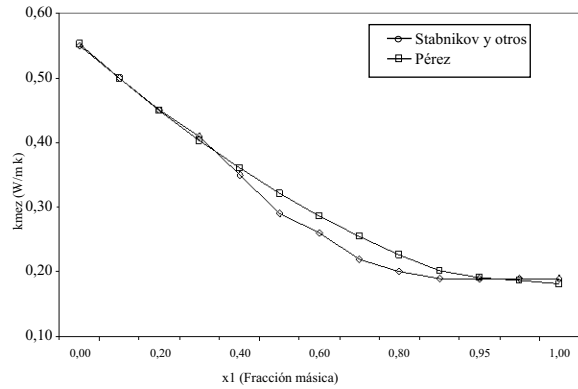


Figura 10 Conductividad térmica de la mezcla etanol-agua a 0 (°C)

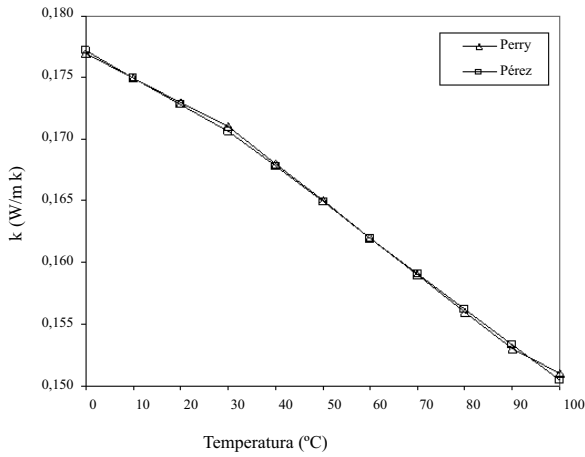


Figura 8 Conductividad térmica del etanol

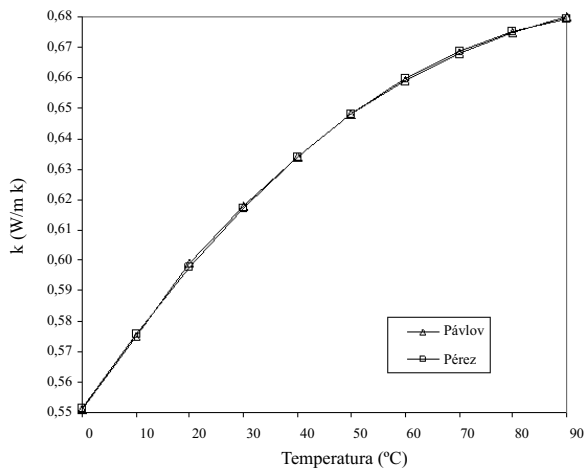


Figura 9 Conductividad térmica del agua

Para la conversión de °INPM a °GL (Ec. 33-36), y de °GL a °INPM (Ec. 37-39) se obtuvieron varias ecuaciones para diferentes intervalos. Los resultados fueron comparados con Stabnikov y otros [6], dando un error promedio de 0,09% y 0,08%, respectivamente. Los datos comparados se evaluaron en todo el intervalo de composiciones y se muestran en las figuras 11 y 12.

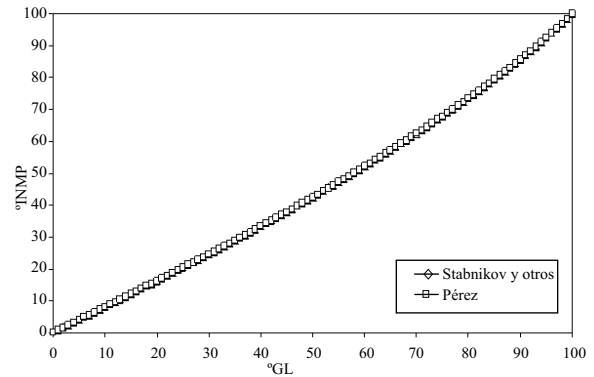


Figura 11 Conversión de °GL a °INPM

El modelo ajustado (Ec. 40) representado en la figura 13 muestra la tensión superficial de etanol que fue comparada con los valores que ofrece el modelo de Ackland [17], presentando un error promedio de 1,68%. En el caso del agua el modelo obtenido (Ec. 41) fue comparado con los resultados reportado en Engineeringtoolbox [18], dando un error promedio de 0,60%. Estos resultados pueden apreciarse en la figura 14. El modelo para la mezcla (Ec. 42) fue validado con anterioridad por Belda y colaboradores [19].

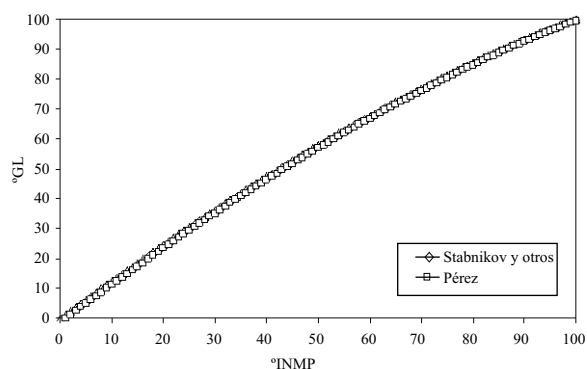


Figura 12 Conversión de °INMP a °GL

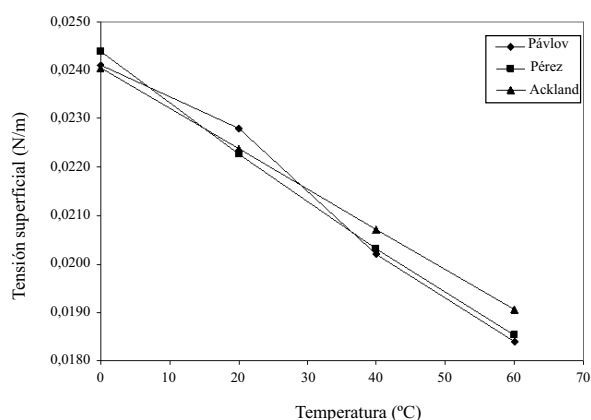


Figura 13 Tensión superficial del etanol

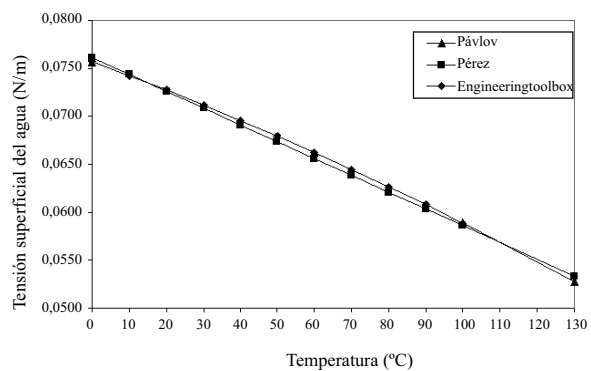


Figura 14 Tensión superficial del agua

La comparación de los modelos obtenidos (Ec. 43-48) reflejados en la figura 15 con los resultados que brinda Thewhiskystore [20], dan un error promedio de 0,71%. Por otra parte se han reportado estudios en la literatura que afirman que la ecuación de Gladstone-Dale [21] ofrece

resultados satisfactorios en la predicción del índice de refracción en función de la composición y densidad de la mezcla.

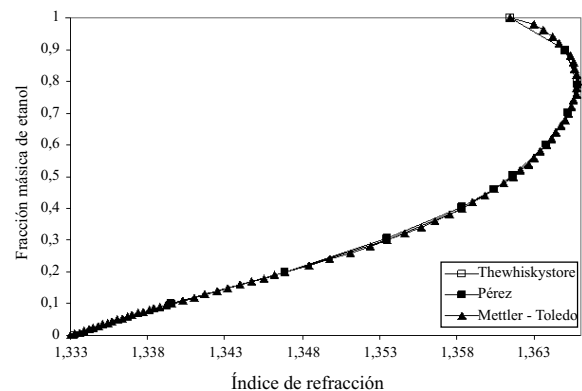


Figura 15 Índice de refracción de la mezcla etanol-agua respecto al aire a 20°C

Conclusiones

Se obtuvieron los modelos que permiten calcular propiedades físicas y termodinámicas de las mezclas etanol-agua como: densidad, viscosidad dinámica, conductividad térmica, tensión superficial e índice de refracción.

Al ser comparados con la bibliografía existente, se puede considerar que los modelos desarrollados en este trabajo, en general, son confiables y pueden ser utilizados para la estimación de las propiedades de la mezcla etanol-agua. Las desviaciones de estos valores con respecto a los reportados por la literatura, se encuentran dentro del intervalo permisible de error para este tipo de trabajo. Los errores en las estimaciones son menores al 5%, en su mayoría.

Nomenclatura

- P Presión del sistema (kPa).
- T Temperatura de la corriente (°C).
- x_l Fracción másica del etanol en la fase líquida (adim.).
- $x_{l,mol}$ Fracción molar del etanol en la fase líquida (adim.).

y_1	Fracción másica del etanol en la fase vapor (adim.).	σ_i	Tensión superficial de los componentes puros (N/m).
y_{1mol}	Fracción molar del etanol en la fase vapor (adim.).	σ_{mez}	Tensión superficial de la mezcla etanol-agua (N/m).
ρ_{iL}	Densidad de los componentes puros en fase líquida (kg/m ³).	n	Índice de refracción de la mezcla etanol-agua (adim.).
ρ_{mezL}	Densidad de la mezcla etanol-agua en fase líquida (kg/m ³).		
ρ_{iV}	Densidad de los componentes puros en fase vapor (kg/m ³).		
ρ_{mezV}	Densidad de la mezcla etanol-agua en fase vapor (kg/m ³).		
μ_{iL}	Viscosidad de los componentes puros en fase líquida (mPa.s)		
μ_{mezL}	Viscosidad de la mezcla etanol-agua en fase líquida (mPa.s)		
μ_{iV}	Viscosidad de los componentes puros en fase vapor (mPa.s)		
μ_{mezV}	Viscosidad de la mezcla etanol-agua en fase vapor (mPa.s)		
Cp_{iG}	Capacidad calórica de los componentes puros en fase gaseosa (J/kmol.K).		
k_{iL}	Conductividad térmica de los componentes puros en fase líquida (W/m.K).		
k_{mezL}	Conductividad térmica de la mezcla etanol-agua en fase líquida (W/m.K).		
k_{iV}	Conductividad térmica de los componentes puros en fase vapor (W/m.K).		
k_{mezV}	Conductividad térmica de la mezcla etanol-agua en fase vapor (W/m.K).		
A_{ij}	Parámetros de interacción binaria para el cálculo de la conductividad térmica (adim.).		
%mas	Porcentaje másico de etanol en la mezcla (adim.).		
%vol	Porcentaje volumétrico de etanol en la mezcla (adim.).		

Referencias

1. L. Venkatesh. "Choice of thermodynamic models for use in simulation programs". *Chemical Engineering World*. Vol. 32. 1997. pp. 155-157.
2. *Why rigorous thermodynamics?*. <http://www.virtualmaterials.com>. Consultada el 20 de octubre de 2001.
3. M. A. Satyro. "Thermodynamics and the simulation engineer". *Chemical Product and Process Modeling*. Vol. 3, 2008. Article 24. The Berkeley Electronic Press. Available at: <http://www.bepress.com/cppm/vol3/iss1/24>.
4. R. H. Perry, D. W. Green. *Manual del Ingeniero Químico*. 6ª. ed. McGraw-Hill. México. 1999. Sección 2. pp. 112-370.
5. K. F. Pávlov. *Problemas y ejemplos para el curso de operaciones básicas y aparatos en tecnología química*. Editorial MIR, Moscú. 1981. pp. 547-560.
6. B. N. Stabnikov, I. M. Roiter, T. B. Prostok. *Alcohol etílico. Manual*. Editora Industria Alimentaria. Moscú. 1976. pp. 10-98.
7. J. V. Herráez, R. Belda, O. Diez. "An equation for the correlation of viscosities of binary mixtures". *Journal of Solution Chemistry*. Vol. 37. 2008. pp. 233-248.
8. «Ethanol refractometry concentration». Mettler-Toledo International Inc. http://us.mt.com/mt/ed/appEdStyle/Ethanol_re_e_0x000248e10002599200076b0e.jsp. Consultada el 20 de enero de 2009.
9. "Densities of water in SI Units», http://www.engineeringtoolbox.com/water-density-specific-weight-d_595.html. Consultada el 15 de noviembre de 2008.
10. D. Harris. *Quantitative Chemical Analysis*, 4ª. ed. Ed. W. H. Freeman and Company, New York. 1995. pp. 36.
11. Departamento Control de Laboratorios. Dirección de Producción y Entrega. Viceministerio para la Producción. *Tablas para el trabajo analítico en los laboratorios de las destilerías y plantas anexas de levadura seca*. MINAZ S/A. pp. 1-16.

12. S. Konchady. *Alcohol palm book*. . Praj Industries Limited. India. 2ª. ed. 2004. pp. 12-45.
13. D. R. Lide. *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. 84ª. ed. online version. CRC Press. Boca Raton (Florida). 2003. pp. 2256-2257.
14. R. C. Reid, J. M. Prausnitz, B. E. Poling. *The properties of gases and liquids*. McGraw Hill Book Company. New York. 4ª. ed. 1987. pp. 433-473.
15. R. Belda, José V. Herráez, O. Diez. "Rheological study and thermodynamic analysis of the binary system (water/ethanol): Influence of concentration". *Physics and Chemistry of Liquids*. Vol. 42. 2004. pp. 467-479.
16. R. Jowitt, F. Escher, B. Hallström, H. F.T. Meffert, W. E. L Spiess, G. Vos. *Physical properties of foods*. Applied Science Publishers. London. 1983. pp. 295-296.
17. T. Ackland. *Ethanol-water physical properties*. <http://homedistiller.org/calc.htm>. Consultada el 28 de enero de 2009.
18. *Surface tension of water in contact with air for temperatures ranging 0-100°C*, http://www.engineeringtoolbox.com/water-surface-tension-d_597.html. Consultada el 25 de enero de 2009.
19. R. Belda, J. V. Herráez, O. Diez. "A study of the refractive index and surface tension synergy of the binary water/ethanol: influence of concentration". *Physics and Chemistry of Liquids*. Vol. 43. 2005. pp. 91-101.
20. *Alcohol and water. Some physically data: Ethanol water refractive index to air (20 °C)*. <http://www.thewhiskystore.de/experts/alcohol.htm>. Consultada el 26 de enero de 2009.
21. J. V. Herráez, R. Belda. "Refractive indices, densities and excess molar volumes of monoalcohols + water". *Journal of Solution Chemistry*. Vol. 35. 2006. pp. 1315-1328.