



Revista UIS Ingenierías

ISSN: 1657-4583

ISSN: 2145-8456

revistaingenierias@uis.edu.co

Universidad Industrial de Santander

Colombia

Botett-Cervantes, Jesús; González-Silva, Germán; Prieto-Jiménez, Natalia

Predicción del equilibrio vapor-líquido de la mezcla acetato de etilo-etanol usando la ecuación de estado de Peng Robinson

Revista UIS Ingenierías, vol. 20, núm. 1, 2021, -Marzo, pp. 135-142

Universidad Industrial de Santander

Bucaramanga, Colombia

DOI: <https://doi.org/10.18273/revuin.v20n1-2021012>

Disponible en: <https://www.redalyc.org/articulo.oa?id=553768365012>

- Cómo citar el artículo
- Número completo
- Más información del artículo
- Página de la revista en redalyc.org

redalyc.org

Sistema de Información Científica Redalyc

Red de Revistas Científicas de América Latina y el Caribe, España y Portugal

Proyecto académico sin fines de lucro, desarrollado bajo la iniciativa de acceso abierto

Predicción del equilibrio vapor-líquido de la mezcla acetato de etilo-etanol usando la ecuación de estado de Peng Robinson

Prediction of the vapor-liquid equilibrium of the ethyl acetate-ethanol mixture using the Peng Robinson EOS

Jesús Botett-Cervantes ¹, Germán González-Silva ², Natalia Prieto-Jiménez ³

¹ Grupo de Investigación Recobro Mejorado, Escuela de Ingeniería de Petróleos, Universidad Industrial de Santander, Colombia. Orcid: 0000-0003-4341-9461. Correo electrónico: jbotettc@correo.uis.edu.co

² Grupo de Modelamiento de Procesos de Hidrocarburos; Universidad Industrial de Santander, Colombia. Orcid: 0000-0002-4642-1092. Correo electrónico: germangs@uis.edu.co

³ Engineering Simulation and Scientific Software ESSS, Brasil. Orcid: 0000-0001-9178-7758. Correo electrónico: natispj@gmail.com.

Recibido: 4 diciembre, 2019. Aceptado: 2 julio, 2020. Versión final: 5 noviembre, 2020.

Resumen

El presente artículo tiene como propósito mostrar la predicción del equilibrio vapor-líquido de una mezcla no ideal mediante modelos termodinámicos como lo es la ecuación de Peng-Robinson para el cálculo de los coeficientes de fugacidades de los componentes en estado gaseoso, y el modelo de Van Laar para hallar los coeficientes de actividad de los componentes en estado líquido. Los resultados se validan mediante el uso del simulador comercial Aspen Plus y la herramienta online “VLE-Calc”, obteniendo resultados similares con los valores experimentales de la mezcla binaria.

Palabras clave: equilibrio vapor-líquido; coeficiente de fugacidad; coeficiente de actividad; Peng Robinson, Van Laar; Azeótropo.

Abstract

This article aims to show the prediction of vapor-liquid equilibrium of a not ideal mixture by thermodynamic models such as the Peng Robinson equation to calculate fugacity coefficients of the components in vapor state and Van Laar model to find activity coefficients of components in the liquid state. The results are validated by using the commercial simulator Aspen Plus and online calculator “VLE-Calc”, showing similar results with the experimental values of the binary mixture.

Keywords: vapor-liquid equilibrium; fugacity coefficient; activity coefficient; Peng Robinson; Van Laar, azeotrope.

1. Introducción

El conocimiento del comportamiento entre componentes en una mezcla es muy importante para el dimensionamiento y diseño de procesos químicos para la

separación en la industria de procesos [1]–[4]. Existen una variedad de modelos que pueden predecir de forma precisa el equilibrio de fases para sistemas binarios o incluso para sistemas multicomponentes [2], [5]–[7].

ISSN impreso: 1657 - 4583. ISSN en línea: 2145 - 8456, CC BY-ND 4.0



Como citar: J. Bonett, G. González, N. Prieto, “Predicción del equilibrio vapor-líquido de la mezcla acetato de etilo-etanol usando la ecuación de estado de Peng Robinson,” *Rev. UIS Ing.*, vol. 20, no. 1, pp. 135-142, 2021, doi: [10.18273/revuin.v20n1-2021012](https://doi.org/10.18273/revuin.v20n1-2021012)

Estos modelos se han desarrollado dependiendo de la naturaleza química de las sustancias que intervienen, y de las interacciones que presentan entre sí. No obstante, la obtención de datos experimentales de equilibrio es de suma importancia para verificar la confiabilidad de dichos modelos a fin de poderlos aplicar. En la literatura se pueden encontrar varios trabajos experimentales relacionados con la obtención de datos de equilibrio vapor-líquido para mezclas de alcohol y ésteres a diferentes condiciones experimentales [8]–[12], para el caso de estudio fue seleccionado los datos reportados por Murti y Winkle [13].

En el cálculo de algunos equilibrios de fases es común encontrar sistemas que tengan puntos azeotrópicos que dificultan la separación de mezclas multicomponentes [14]–[16]. Estos azeótropos son limitantes termodinámicas presentes en estos sistemas, por tal razón, es de vital importancia conocer profundamente el comportamiento de estas mezclas para que dichas limitaciones no afecten de manera considerable la separación de los componentes. Se aplicaron herramientas computacionales comerciales (Aspen plus) utilizadas en gran medida en la industria y literatura [17]–[19] y aplicaciones online, importantes para determinar la validez de la programación VLE-Calc.

2. Materiales y métodos

El acetato de etilo se produce normalmente mediante la reacción reversible en fase líquida de ácido acético con etanol en presencia de un catalizador ácido [20]. Es sintetizado en la industria a través de la esterificación Fisher del etanol y ácido acético y también puede ser producido por deshidrogenación del etanol. Sin embargo, la etapa de separación de los bioproductos obtenidos por este último proceso es complicada [1], por el hecho de que el etanol forma azeótropos con el agua y con el acetato de etilo, pero pueden ser, en la mayoría de los casos, desplazado mediante destilación por oscilación de presión o destilación con membrana. La separación del acetato de etilo y el etanol es importante pero difícil debido a sus puntos de ebullición cercanos y formaciones de azeótropos [21] a diferentes rangos de temperatura y presión, por lo que plantea la necesidad de llevar un control sobre las variables de operación, con el fin de mejorar la eficiencia y el rendimiento en los procesos químicos llevados a cabo en la industria.

2.1. Modelo de Van Laar para el cálculo de los coeficientes de actividad

La derivación de la ecuación de Van Laar permite observar la relación entre los dos modelos. Van Laar usó las mismas reglas de mezclado (sin usar parámetros de

interacción) y asumió que el volumen para líquidos puede ser aproximado (si el sistema se encuentra lejos del punto crítico) a través de su co-volumen ($V_i=b_i$). Esto refleja las suposiciones hechas, las cuales están asociadas al comportamiento de los componentes como líquido puro a la temperatura de disolución y que también pueden tener tamaños moleculares diferentes, con estas suposiciones llegó a las siguientes ecuaciones:

$$\ln(\gamma_1) = A_{12} \left(\frac{A_{21}x_2}{A_{12}x_1 + A_{21}x_2} \right)^2 \quad (1)$$

$$\ln(\gamma_2) = A_{21} \left(\frac{A_{12}x_1}{A_{12}x_1 + A_{21}x_2} \right)^2 \quad (2)$$

Es importante resaltar que los dos parámetros de la ecuación de Van Laar deben ser tratados como parámetros empíricos para ser ajustados a datos experimentales. No obstante, proveen resultados satisfactorios en el estudio del equilibrio de sistemas binarios y pueden ser encontrados en la literatura para las diferentes mezclas binarias posibles que puedan existir [22]. Para el caso estudiado, los parámetros poseen los siguientes valores:

$$A_{12} = 0.8552 \quad (3)$$

$$A_{21} = 0.7526 \quad (4)$$

2.2. Consideraciones y algoritmo para la presión de burbuja

Para la determinación del equilibrio de fases del sistema binario acetato de etilo-etanol, se parte de la ecuación que relaciona el factor de fugacidad y el coeficiente de actividad:

$$y_i \Phi_i P_i = x_i \gamma_i P_i^{sat} \quad (5)$$

Como se requiere obtener las curvas de punto de burbuja y punto de rocío, se realizó el siguiente procedimiento:

- i. Calcular las presiones de saturaciones de los componentes de la mezcla a la temperatura del sistema mediante la ecuación de Antoine,

$$\ln P = C_1 - \frac{C_2}{T + C_3} \quad (6)$$

- ii. Asumir los valores de los coeficientes de fugacidad igual a la unidad, para cada proporción de las fracciones líquidas de los componentes, con el objetivo de iniciar las iteraciones.

iii. Se calculan los coeficientes de actividad de los componentes utilizando las ecuaciones de Van Laar (ecuaciones 1 y 2).

iv. Calculadas las presiones de saturaciones y los coeficientes de actividad de los componentes, se calcula la presión del sistema mediante la ecuación 5:

$$P_i = \sum_{i=1}^n \frac{\gamma_i P_i^{sat} x_i}{\Phi_i} \quad (7)$$

v. Con el cálculo de la presión de burbuja a las proporciones de fracciones líquidas evaluadas, se calculan las fracciones de vapor con la ecuación 6:

$$y_i = \frac{x_i * \gamma_i * P_i^{sat}}{\Phi_i * P_i} \quad (8)$$

vi. Con las fracciones de vapor, se recalculan los coeficientes de fugacidad de los componentes con la ecuación 9, la cual correlaciona la fugacidad de los componentes al considerarlos puros y la fugacidad de los componentes en estado de saturación.

$$\Phi_i = \frac{\widehat{\Phi}_i}{\Phi_i^{sat}} \exp \left[\frac{-v_i^L * (P_i - P_i^{sat})}{RT} \right] \quad (9)$$

Es importante resaltar que el volumen de líquido de los componentes fue calculado con la ecuación de Raoult [23], la cual está en función de la temperatura y las propiedades críticas del componente

$$V_i^L = V_c Z_c (1 - T_r)^{2/7} \quad (10)$$

vii. Calculados los coeficientes de fugacidad para cada componente, se calcula nuevamente la presión con el propósito de establecer una comparación entre la presión calculada con los coeficientes de fugacidad recalculados y el primer cálculo de la presión. Cuando el delta de presiones sea menor a una tolerancia establecida, se detienen los cálculos iterativos y se dan por obtenidos los valores de presión de burbuja.

El coeficiente de fugacidad de los componentes en solución fue calculado a partir de la ecuación Peng Robinson (16)

$$\ln \widehat{\Phi}_i = \frac{b_i}{b} (Z - 1) - \ln(Z - B) + \frac{A}{2\sqrt{2}B} \left(\frac{b_i}{b} - \delta_i \right) \ln \left(\frac{2Z + B(1 + \sqrt{2})}{2Z + B(1 - \sqrt{2})} \right) \quad (11)$$

El factor de compresibilidad de la mezcla binaria se calculó teniendo en cuenta las reglas de mezclado que involucran las ecuaciones originales de la ecuación cúbica de estado de Peng Robinson.

$$Z^3 - (1 - B)Z^2 + (A + 3B^2 - 2B)Z - AB + B^2 + B^3 = 0 \quad (12)$$

Fueron usadas las siguientes reglas de mezclado:

$$a_i = \frac{0.45724 R^2 T_c^2}{P_c} \alpha \quad (13)$$

$$\alpha = [1 + f_\omega (1 - T_r^{0.5})]^2 \quad (14)$$

$$f_\omega = 0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2 \quad (15)$$

$$b_i = \frac{0.0778 R T_c}{P_c} \quad (16)$$

$$B = \frac{bP}{RT} \quad (17)$$

$$\delta_i = 2 \left(\frac{a_i}{a} \right)^{1/2} \quad (18)$$

$$A = \frac{aP}{R^2 T^2} \quad (19)$$

$$a = \sum \sum Y_i Y_j a_{ij} \quad (20)$$

$$a_{ij} = \sqrt{a_i a_j} (1 - K_{ij}) \quad (21)$$

$$b = \sum Y_i b_i \quad (22)$$

2.3. Curva de punto de rocío

En esta sección se explicará en detalle el algoritmo para la obtención de esta curva del punto de rocío.

Las presiones de saturación fueron calculadas utilizando la ecuación de Antoine, para la primera iteración el valor de los coeficientes de fugacidad y actividad para cada proporción de los componentes en la mezcla binaria es igual a la unidad. La razón de esto es debido a la dependencia de estos con la composición de la fase líquida que aún es desconocida, la presión del sistema se determina mediante la depende exclusivamente de las fracciones molares gaseosas de los componentes:

$$P_i = \frac{1}{\sum_{i=1}^n \frac{y_i \Phi_i}{\gamma_i P_i^{sat}}} \quad (23)$$

Obtenida el valor de la presión en el paso anterior, se calculan las composiciones de la fase líquida

$$x_i = \frac{y_i \Phi_i P_i}{\gamma_i P_i^{sat}} \quad (24)$$

Mediante el cálculo de las fracciones líquidas, se pueden determinar los coeficientes de actividad utilizando el modelo de Van Laar, la presión es recalcula, usando la ecuación 23, teniendo en cuenta que se usarán los coeficientes de actividad del paso anterior. Como no se han determinado los coeficientes de fugacidad, se procede al cálculo de estas con la ecuación 11 y las ecuaciones propuestas de reglas de mezclado.

Se realiza la normalización de las fracciones para el caso la suma no sea uno. Si el error absoluto del cálculo del coeficiente de fugacidad cumple con la tolerancia establecida, se procede a determinar la presión con la ecuación 25 y se compara con la presión obtenida anteriormente terminando la iteración.

3. Resultados y discusión

Los algoritmos de curva de rocío y burbuja fueron codificados en MATLAB®, Estas curvas son presentadas en la Figura 1, se puede observar que fue posible estimar el punto azeotrópico de la mezcla. Los valores de las constantes de la ecuación de Antoine y unidades son presentados en la Tabla 1.

El azeótropo simulado se genera a una presión de 26.65 KPa, con fracciones molares de líquido y de vapor de 0.6674 y 0.6512, respectivamente.

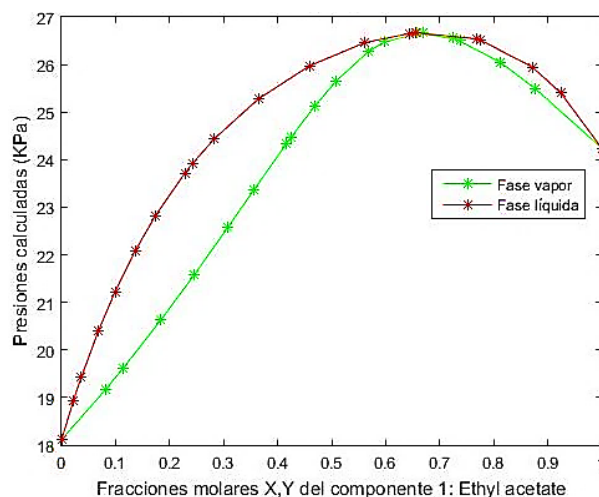


Figura 1. Diagrama de equilibrio líquido-vapor de Acetato de etilo y Etanol (Matlab).

Tabla 1. Constantes de Antoine para los componentes Acetato de etilo-Etanol [24]

Componente	A	B	C
Acetato de etilo (1)	14.5813	3022.25	-47.8833
Etanol (2)	16.1952	3423.53	-55.7152

En ese orden de ideas, en la Figura 2 se presenta las curvas de equilibrio vapor-líquido de la mezcla binaria en conjunto con los datos experimentales [13], a una temperatura de 313.15 K, se observa que la presión de saturación del acetato de etilo (primer componente) es de aproximadamente 26.5 KPa y la presión de saturación para el etanol es de aproximadamente 18.7 KPa; también se puede observar que existe un azeótropo a una presión de aproximadamente de 28.798 KPa, en el cual las fracciones de líquido y de vapor del acetato de etilo son similares ($x=0.65590$, $y=0.65860$).

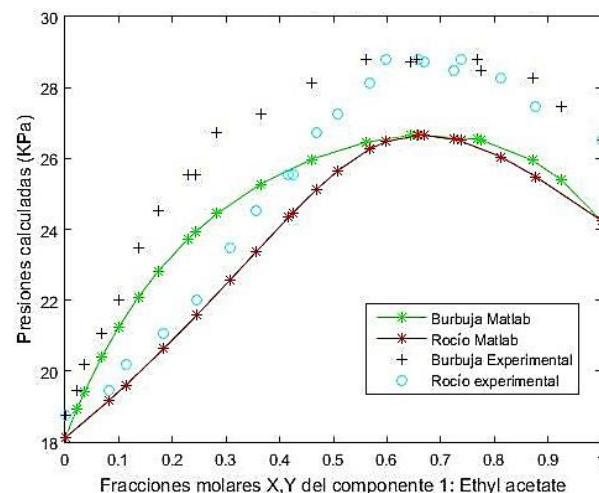


Figura 2. Diagrama de equilibrio líquido-vapor de acetato de etilo y etanol (experimental).

Al compararlo con las curvas basadas en el algoritmo planteado arriba, se muestra el diagrama de equilibrio vapor-líquido para la mezcla binaria, evaluando, de forma visual, el rendimiento del algoritmo programado. El azeótropo simulado se genera a una presión de 26.65 KPa, con fracciones molares de líquido y de vapor de 0.6674 y 0.6512, respectivamente. Las presiones de saturación obtenidas mediante la ecuación de Antoine son de 24.241 KPa, para el caso del Acetato de etilo y 18.112 para el etanol, mostrando cercanía a los resultados experimentales.

Existe un azeótropo a una presión de aproximadamente de 28.798 KPa, en el cual las fracciones de líquido y de vapor del acetato de etilo son similares ($x=0.65590$, $y=0.65860$).

En la Figura 3 se observa que el equilibrio vapor-líquido de la mezcla fue calculada por una herramienta online llamada "VLE-Calc" el cual es de acceso gratis y muy práctico para obtener diagramas de equilibrio. Siguiendo con las mismas características del sistema experimental y evaluado mediante la programación en MATLAB®, la gráfica fue generada para una temperatura de 313.15 K y se observa que la variación entre las presiones de saturaciones de los componentes es mínima. Sin embargo, el azeótropo se obtiene a una presión de 27.528 KPa, con fracciones molares de líquido y gas de 0.7 y 0.69, respectivamente.

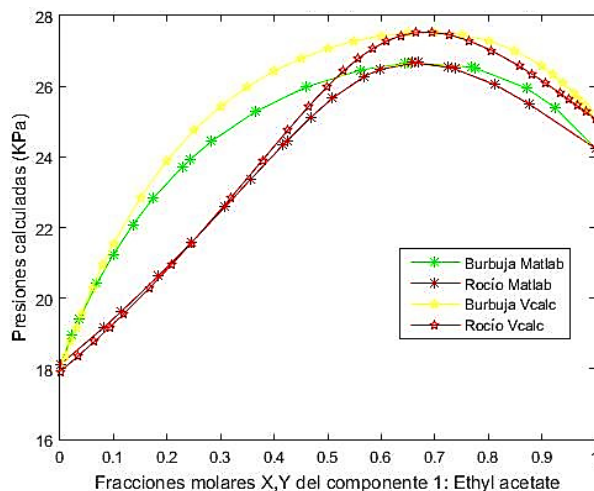


Figura 3. Diagrama de equilibrio líquido-vapor de Acetato de etilo y Etanol (VLE-Calc).

En la Figura 4 se muestran las curvas de equilibrio obtenidas con el simulador comercial Aspen Plus, con el objetivo de validar los resultados de la programación mediante la comparación de los valores. En este caso, el azeótropo puede ser visualizado a una presión de 28.3

KPa y las fracciones molares obtenidas son de 0.638 para la fase de líquido y de 0.641 para la fase vapor.

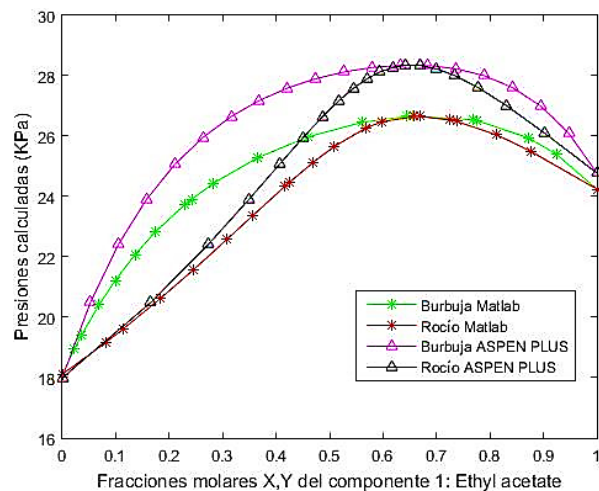


Figura 4. Diagrama de equilibrio líquido-vapor de Acetato de etilo y Etanol (Aspen Plus).

Existe una variación muy pequeña con las presiones de burbuja y rocío obtenidas (diferencia de 2.15 KPa en promedio). La Figura 5 contiene los resultados obtenidos de las distintas fuentes (experimental y simuladores) y se observa que existe una variación de 2.15 KPa en promedio en comparación con las presiones de burbuja y rocío obtenidas.

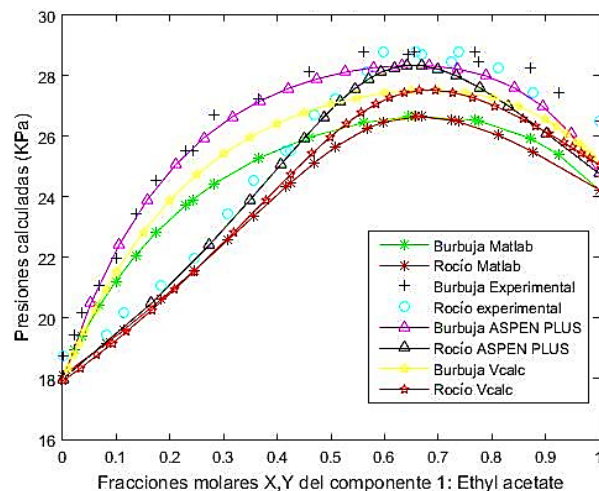


Figura 5. Diagrama de equilibrio líquido-vapor de Acetato de etilo y Etanol.

La Tabla 2 contiene el resumen los datos de la composición del azeótropo binario para cada diagrama, se observa que los errores relativos, referente a los datos experimentales son inferiores al 7.69 %, sin embargo, para Figurski y Malanowski [25] el porcentaje llega al 8.9 % en la predicción del azeótropo.

Tabla 2. Datos de composición del azeótropo binario

Diagrama EVL	Presión (KPa)	Composición molar Acetato de etilo				
		% Error	(X)	% Error	(Y)	% Error
Experimental [13]	28.798		0.65		0.6580	
Figurski y Malanowski [25]	28.36	1,52	0.708	8.92	0.68	3.34
VLE-Calc	27.52	4.44	0.7	7.69	0.693	5.32
ASPEN PLUS	28.3	1.73	0.638	1.85	0.641	1,38
Programado	26.65	7.46	0.66	1.54	0.6512	0.18

La Figura 6 muestra los valores de las fracciones molares calculadas basándose en el algoritmo. En esta gráfica también se puede observar el azeótropo presente a la temperatura evaluada a 40 °C.

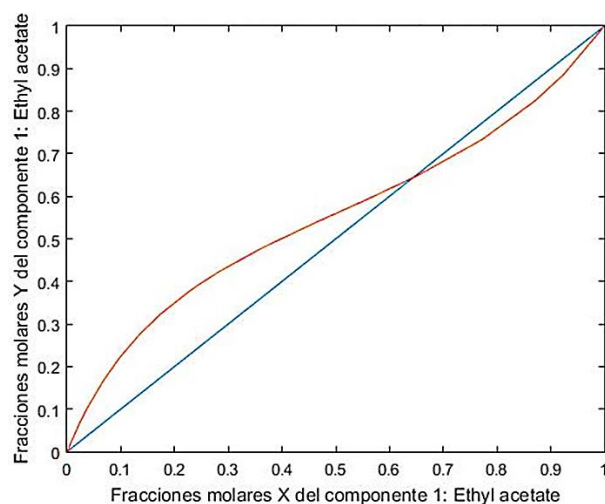


Figura 6. Diagrama de equilibrio líquido-vapor de Acetato de etilo y Etanol (X vs Y).

4. Conclusiones

Según los resultados obtenidos con el algoritmo programado, se puede asegurar que la herramienta de programación hecha sirve como base para observar el comportamiento de una mezcla binaria no ideal, con un porcentaje de error inferior al 8%, generando valores cercanos a la realidad. Sin embargo, es necesario evaluar los resultados obtenidos a través de la modificación de los modelos termodinámicos planteados en este trabajo de investigación, por lo que se propone el uso de otras ecuaciones para calcular los coeficientes de actividad tales como el modelo de Margules, el modelo de Wilson, entre otras, pues se observa una subestimación de los valores del punto azeotrópico en comparación con los cálculos realizados con Aspen.

Agradecimientos

Este artículo es resultado de la investigación en termodinámica financiado por de la convocatoria “Capital Semilla para Investigación” Proyecto con código 2370 y semillero en nanotecnología, modelado y simulación numérica aplicada a la industria del petróleo, código 5482 de la Vicerrectoría de Investigación y Extensión de la Universidad Industrial de Santander.

Referencias

- [1] M. L. Corazza, W. A. Fouad, W. G. Chapman, “PC-SAFT predictions of VLE and LLE of systems related to biodiesel production”, *Fluid Phase Equilibria*, vol. 416, pp. 130-137, 2016, doi: 10.1016/j.fluid.2015.09.044
- [2] P. M. Mathias, “Effect of VLE uncertainties on the design of separation sequences by distillation – Study of the benzene–chloroform–acetone system”, *Fluid Phase Equilibria*, vol. 408, pp. 265-272, 2016, doi: 10.1016/j.fluid.2015.09.004
- [3] G. González, N. Prieto, I. Mercado, “Large Eddy Simulation (LES) Aplicado a un lecho fluidizado gas–sólido. Parte I: Reactor a escala de laboratorio”, *Revista UIS Ingenierías*, vol. 17, no. 1, pp. 93-104, 2018, doi: 10.18273/revuin.v17n1-2018009
- [4] G. González, N. P. Jiménez, O. F. Salazar, “Fluid Dynamics of Gas-Solid Fluidized Beds”, en *Advanced Fluid Dynamics*, 2012, pp. 39.
- [5] S. I. Sandler, *Models for Thermodynamic and Phase Equilibria Calculations*. Taylor & Francis, Boca Raton, FL, USA: CRC Press, 1993.
- [6] A. Zinser, K. Ye, L. Rihko-Struckmann, K. Sundmacher, “A Dynamic Method for Computing Thermodynamic Equilibria in Process Simulation”, en *Computer Aided Chemical Engineering*, vol. 37, Elsevier, 2015, pp. 299-304.
- [7] N. P. Jiménez, G. G. Silva, “Comparative Study of Equations of State for the Dew Curves Calculation in High Pressure Natural Gas Mixtures”, *Revista Logos Ciencia & Tecnología*, vol. 11, no 1, pp. 152-164, 2019, doi: 10.22335/rlct.v11i2.743
- [8] I. Mertl, “Liquid-vapour equilibrium. II. Phase equilibria in the ternary system ethyl acetate-ethanol-water”, *Collect. Czech. Chem. Commun.*, vol. 37, no. 2, pp. 366-374, 1972, doi: 10.1135/cccc19720366

- [9] H. Kuramochi, K. Maeda, S. Kato, M. Osako, K. Nakamura, S. Sakai, "Application of UNIFAC models for prediction of vapor-liquid and liquid-liquid equilibria relevant to separation and purification processes of crude biodiesel fuel", *Fuel*, vol. 88, no. 8, pp. 1472-1477, 2009, doi: 10.1016/j.fuel.2009.01.017
- [10] I. R. Navarro-Espinosa, C. A. Cardona, J. A. López, "Experimental measurements of vapor-liquid equilibria at low pressure: Systems containing alcohols, esters and organic acids", *Fluid Phase Equilibria*, vol. 287, no. 2, pp. 141-145, 2010, doi: 10.1016/j.fluid.2009.10.002
- [11] J. Dhanalakshmi, P. S. T. Sai, A. R. Balakrishnan, "Effect of Inorganic Salts on the Isobaric Vapor-Liquid Equilibrium of the Ethyl Acetate-Ethanol System", *J. Chem. Eng. Data*, vol. 58, no. 3, pp. 560-569, 2013, doi: 10.1021/je300886k
- [12] J. G. Veneral *et al.*, "Thermophysical properties of biodiesel and related systems: Low-pressure vapour-liquid equilibrium of methyl/ethyl *Jatropha curcas* biodiesel", *The Journal of Chemical Thermodynamics*, vol. 60, pp. 46-51, 2013, doi: 10.1016/j.jct.2013.01.018
- [13] P. Murti, M. Van Winkle, "Vapor-Liquid Equilibria for Binary Systems of Methanol, Ethyl Alcohol, 1-Propanol, and 2-Propanol with Ethyl Acetate and 1-Propanol-Water", *Ind. Eng. Chem. Chem. Eng. Data Series*, vol. 3, no. 1, pp. 72-81, 1958, doi: 10.1021/i460003a016
- [14] A. Randová *et al.*, "Separation of azeotropic mixture acetone + hexane by using polydimethylsiloxane membrane", *Separation and Purification Technology*, vol. 170, pp. 256-263, 2016, doi: 10.1016/j.seppur.2016.06.061
- [15] S. Yuan, C. Zou, H. Yin, Z. Chen, W. Yang, "Study on the separation of binary azeotropic mixtures by continuous extractive distillation", *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 93, pp. 113-119, 2015, doi: 10.1016/j.cherd.2014.05.005
- [16] A. Iqbal, S. A. Ahmad, "Pressure swing distillation of azeotropic mixture – A simulation study", *Perspectives in Science*, vol. 8, pp. 4-6, 2016, doi: 10.1016/j.pisc.2016.01.001
- [17] L. E. Øi, J. Hovland, "Simulation of Condensation in Compressed Raw Biogas Using Aspen HYSYS", en *Linköping Electronic Conference Proceedings*, 2018, pp. 31-36, doi: 10.3384/ecp1815331
- [18] D. F. Samayoa Alvarado, "Desarrollo de un sistema tutorial inteligente (STI) de procesos de destilación utilizando los programas Simulis Thermodynamics V.2.0. y Aspen Hysys V.8.0.", tesis de grado, Universidad de San Carlos de Guatemala, 2018.
- [19] K. Darkwah, S. E. Nokes, J. R. Seay, B. L. Knutson, "Mechanistic simulation of batch acetone-butanol-ethanol (ABE) fermentation with in situ gas stripping using Aspen Plus™", *Bioprocess Biosyst Eng.*, vol. 41, no. 9, pp. 1283-1294, 2018, doi: 10.1007/s00449-018-1956-6.
- [20] D. Singh, R. K. Gupta, V. Kumar, "Experimental studies of industrial-scale reactive distillation finishing column producing Ethyl acetate", *Industrial and Engineering Chemistry Research*, vol. 53, no. 25, pp. 10448-10456, 2014, doi: 10.1021/ie404443g
- [21] A. Hasanoğlu, Y. Salt, S. Keleşer, S. Özkan, S. Dinçer, "Pervaporation separation of ethyl acetate-ethanol binary mixtures using polydimethylsiloxane membranes", *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, vol. 44, no. 3, pp. 375-381, mar. 2005, doi: 10.1016/j.ccep.2004.06.001
- [22] B. E. Poling, J. M. Prausnitz, J. O. Connell, *The Properties of Gases and Liquids*, 5.^a ed. New York, NY, USA: McGraw-Hill Professional, 2000.
- [23] H. G. Rackett, "Equation of state for saturated liquids", *J. Chem. Eng. Data*, vol. 15, no. 4, pp. 514-517, oct. 1970, doi: 10.1021/je60047a012
- [24] J. M. Smith, H. C. V. Ness, M. M. Abbott, *Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics*, 7th Edition. Boston, MA, USA: McGraw Hill Higher Education, 2005.
- [25] G. Figurski, S. K. Malanowski, "Vapor-liquid equilibrium studies of the ethanol+ethyl acetate system", *Fluid Phase Equilibria*, vol. 148, no. 1-2, pp. 161-169, 1998, doi: 10.1016/S0378-3812(97)00341-5