



UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA AMAZONIA
PERUANA
FACULTAD DE INGENIERIA QUIMICA



**“SIMULACIÓN DE LA DESHIDRATACIÓN DE BIOETANOL
AZEOTRÓPICO DE LA PLANTA PILOTO DE ALCOHOL DE LA FIQ-
UNAP, MEDIANTE LA PLATAFORMA DE CHEMCAD V.6.2”**

TESIS

PARA OPTAR EL TITULO DE

INGENIERO QUÍMICO

PRESENTADO POR LOS BACHILLERES

FRANCO ANTONIO ROSS RUIZ
franco.ross30@gmail.com

DEIVIS GABRIEL MERA BARDALES
deivis-1210@hotmail.com

ASESOR:

ING. VICTOR GARCÍA PÉREZ

IQUITOS-PERU

2014

DEDICATORIA

Deivis

Con todo mi cariño y mi amor para las personas que hicieron todo en la vida para que yo pudiera lograr mis sueños, por motivarme y darme su apoyo incondicional, cuando sentía que el camino se terminaba, a ustedes por siempre queridos padres, hermanos y a mi querida Kiara los llevo en mi corazón y mi gratitud por siempre.

Franco

A mis queridos padres que en este andar por la vida, influyeron con sus lecciones y experiencias en formarme como una persona de bien y preparada para los retos que pone la vida, a todos y cada uno de ellos les dedico cada una de estas páginas que fueron escritas en esta tesis.

AGRADECIMIENTO

Esta tesis, si bien ha requerido de esfuerzo y mucha dedicación por parte de los autores y su asesor de tesis, no hubiese sido posible su finalización sin la cooperación desinteresada de todas y cada una de las personas que nos apoyaron y muchas de las cuales han sido un soporte muy fuerte en momentos difíciles.

Primero y antes que nada, dar gracias a Dios, por estar con nosotros en cada paso que damos, por fortalecer nuestros corazones e iluminar nuestras mentes y por haber puesto en nuestro camino a aquellas personas que han sido nuestro soporte y compañía durante todo el periodo de estudio.

Agradecer hoy y siempre a nuestras familias porque sé que procuran nuestro bienestar y nos dan la fortaleza necesaria para seguir adelante.

FRANCO/DEIVIS

ÍNDICE

Dedicatoria

Agradecimientos

Índice

Resumen

x

I. INTRODUCCIÓN

xii

II. ANTECEDENTES

xiii

III. JUSTIFICACIÓN

xix

IV. OBJETIVOS

4.1. OBJETIVO GENERAL

xxi

4.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

xxi

CAPÍTULO I

FUNDAMENTO TEÓRICO

1.1.	Destilación	1
1.2.	Valores K y volatilidad relativa	2
1.3.	Sistemas ideales y no ideales	6
1.4.	Efecto de la temperatura, presión y composición sobre los valores de la volatilidad	8
1.4.1.	Efecto de la temperatura y presión	8
1.4.2.	Efecto de la composición	10
1.5.	Diagrama de fase	13
1.5.1	Diagramas Temperatura-Composición	13
1.6.	Azeótropos	15
1.7.	Columnas de destilación de multicomponentes no ideal	17
1.8.	Procesos de deshidratación de bioetanol	17
1.8.1..	Destilación al vacío	17
1.8.2.	Destilación azeotrópica	18
1.8.3.	Destilación extractiva	22

1.8.4.	Adsorción con tamices moleculares	25
--------	-----------------------------------	----

CAPÍTULO II

SIMULACIÓN DE PROCESOS

2.1.	Simulación: definiciones e importancia	27
2.2.	Habilidades necesarias para la simulación de procesos	27
2.3.	Aplicación de la simulación de procesos	28
2.4.	Estrategia para realizar el estudio de simulación	30
2.4.1.	Definición del problema	30
2.4.2.	Formación del modelo matemático del problema	31
2.4.3.	Organización de las ecuaciones	32
2.4.4.	Cálculo	32
2.5.	Uso del simulador Checad v-6.2	34
2.5.1.	Características generales del Chemcad	34

CAPITULO III

MODELOS QUE DESCRIBEN LA COLUMNA DE DESTILACIÓN

3.1.	Modelado de la columna	36
3.2.	Modelamiento físico	36
3.3.	Modelamiento matemático	37
3.4.	Modelamiento matemático generalizado de una columna de destilación	38
3.4.1.	Balances de materia y energía	39
3.5.	Modelos de columna y etapas	40
3.6.	Métodos cortos y optimización de columnas	43
3.7.	Métodos de diseño para sistemas binarios	43
3.8.	Distribución de componentes	43
3.9.	Número de etapas de equilibrio	44
3.9.1.	Método de Mc Cabe-Thiele	44
3.9.2.	La ecuación de Smoker	45

3.10.	Destilación de multicomponentes: Consideraciones generales	48
3.10.1.	Método de Hengstebeck	48
3.10.2.	Método de convergencia	51
3.10.3.	Número mínimo de etapas	52
3.10.4.	Reflujo mínimo	53
3.10.5.	Relaciones entre etapas y reflujo	55
3.10.6.	Ubicación de la etapa de alimentación	57

CAPÍTULO IV

DESTILACIÓN EXTRACTIVA

4.1.	Introducción	59
4.2.	Pasos a seguir en la destilación extractiva	59
4.3.	Dificultades o restricciones en una columna extractiva	61
4.4.	Variables del proceso a tener en cuenta	61
4.5.	Corrientes a controlar	61

CAPÍTULO V

SIMULACIÓN EN ESTADO ESTABLE

5.1.	Introducción	63
5.2.	Proceso de deshidratación	63
5.3.	Software de simulación Chemcad	63
5.4.	Construcción de la secuencia	64
5.5.	Construcción del diagrama de flujo simulado	68
5.6.	Parámetros de las corrientes de alimentación	68
5.7.	Parámetros de los equipos	69
5.8.	Solvente empleado	70
5.9.	Descripción de la simulación	70
5.10.	Resultados obtenidos	72

CONCLUSIONES	73
RECOMENDACIONES	74
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	75
ANEXOS	77
Anexo 01: Diagrama de Planta Piloto de Alcohol	78
Anexo 02: Diagrama de Planta Piloto de alcohol con inclusión de etapa de flujo simulado para obtener bioetanol carburante	79
Anexo 03: Metodología para simular procesos en un simulador	80
PASOS PARA INICIAR LA SIMULACIÓN EN CHEMCAD	81 - 98

ÍNDICE DE CUADROS, FIGURAS

	Pág.
FIGURA N° 1.1: Concepto de volatilidad relativa	5
FIGURA N° 1.2: Efecto de la presión y temperatura	9
FIGURA N° 1.3: Efecto de la composición	11
FIGURA N° 1.4: Razones de coeficientes de actividad	12
FIGURA N° 1.5: Diagrama temperatura composición	14
FIGURA N° 1.6: Tipos comunes de diagrama de equilibrio	15
FIGURA N° 1.7: Columna de destilación al vacío	18
FIGURA N° 1.8: Mapa de curva residual	21
FIGURA N° 1.9: Destilación azeotrópica	21
FIGURA N° 1.10: Representación esquemática de la columna de destilación	23
FIGURA N° 1.11: Diagrama esquemático de destilación extractiva	23

FIGURA N° 1.12: Diagrama esquemático de destilación de bioetanol con tamices moleculares	26
FIGURA N° 3.1a: Modelo de etapa de fraccionamiento	38
FIGURA N° 3.1b: Etapas múltiples	39
FIGURA N° 3.2: Modelo de etapa de fraccionamiento para diseño riguroso	40
FIGURA N° 3.3: Correlación de Gilliland	55
FIGURA N° 3.4: Correlación de Erbar - Maddox	57
FIGURA N° 4.1: Diagrama de curva de equilibrio Glicerol-Agua a 1.00 atm	60
FIGURA N° 4.2: Diagrama de curva de equilibrio Glicerol-Etanol a 1.00 atm	60
FIGURA 5.1. Líneas de ingreso y salida	65
FIGURA 5.2. Selección de columna de destilación	66
FIGURA 5.3. Selección de la bomba	67
FIGURA 5.4. Selección de línea de conexión	68
FIGURA 5.5.: Diagrama de flujo simulado	68

RESUMEN

SIMULACIÓN DE LA DESHIDRATACIÓN DE BIOETANOL AZEOTRÓPICO DE LA PLANTA PILOTO DE ALCOHOL DE LA FIQ-UNAP, MEDIANTE LA PLATAFORMA DE CHEMCAD V.6.2

Autores:

**Franco Antonio Ross Ruiz
Deivis Gabriel Mera Bardales**

Asesor: Ing. Víctor García Pérez

En el primer capítulo del presente trabajo, se desarrolla el fundamento teórico de la destilación y sus distintas técnicas de deshidratación de etanol.

Se define la volatilidad relativa y los valores de K que es una medida de la tendencia del componente a vaporizarse, se explica el comportamiento de las mezclas ideales y no ideales, como obedecen a las diferentes leyes, el efecto de la temperatura, presión, composición sobre estas sustancias; se explica las desviaciones del sistema ideal y la formación de azeótropos; también se explica los diferentes procesos de deshidratación del bioetanol azeotrópico.

En el Capítulo II, se muestra la importancia de la simulación en el diseño y optimización de procesos químicos, habilidades necesarias para la simulación y su aplicación que no sólo es para diseñar procesos, sino también para modificar y monitorear procesos químicos de tal forma poder reducir los costos operativos; además se presenta una breve descripción del software a emplear y sus características como una poderosa herramienta de optimización de procesos químicos.

En el Capítulo III, se representa los modelos que describen la columna de destilación y se desarrolla el modelo matemático generalizado de una columna,

realizando balances de materia y energía, para mezclas binarias y para sistemas multicomponentes.

En el Capítulo IV, se describe la destilación extractiva del bioetanol, sus pasos a seguir, las dificultades que se pueden presentar, las variables del proceso a tener en cuenta y las corrientes a controlar.

En el capítulo V, se realiza la simulación, de acuerdo al objetivo del trabajo que es la deshidratación del bioetanol azeotrópico obtenido en la planta piloto de alcohol como materia prima, primero se construye el diagrama de flujo simulado, empleando los equipos que se indican en el trabajo, se introdujo los datos de ingreso en las corrientes de alimentación y en los equipos; posteriormente se ejecutó la simulación (después de varias iteraciones, hasta lograr los datos óptimos del proceso), logrando así un 99.98 % de recuperación del bioetanol , con una concentración de salida como producto de cabeza de la columna extractiva del 99.994 fracción mol, que era el objetivo general del presente trabajo.

I. INTRODUCCIÓN

Actualmente, la deshidratación del bioetanol con fines carburantes es uno de los procesos más utilizados en el mundo. Las razones por las cuales el etanol se ha convertido en el compuesto oxigenado de mayor demanda se encuentran en sus propiedades físico-químicas y en que por ser un compuesto proveniente de materia prima biológica renovable, promete la sostenibilidad ambiental y económica del proceso.

La necesidad de nuevos productos, así como, una nueva cultura del cuidado del medio ambiente, del ahorro y optimización de energía, el uso racionalizado de combustibles, etcétera, hace necesario que la ingeniería química busque alternativas de bajo presupuesto y factibles para la solución de estos nuevos retos. La simulación de procesos es una herramienta eficaz y efectiva para el análisis, la síntesis y la optimización de proceso, lo que ayuda proponer las diferentes alternativas para resolver estos retos modernos.

Son muchos los estudios que se han enfocado en el desarrollo de técnicas para deshidratar el bioetanol, entre los cuales se encuentran la destilación al vacío, azeotrópica, extractiva, la adsorción con tamices moleculares, la preevaporación, y los procesos híbridos. Una de las técnicas más utilizadas en la industria es la destilación extractiva. Los bajos consumos energéticos que acarrea esta operación acompañados de los competentes costos de inversión inicial y de operación, hacen de la destilación extractiva una tecnología atractiva para deshidratar bioetanol. Por medio del simulador de procesos CHEMCAD V.6.2, se han determinado las condiciones de operación para la deshidratación del bioetanol por destilación extractiva con glicerol a partir del bioetanol Azeotrópico obtenido en la planta piloto de la FIQ-UNAP de concentración de alcohol es del 89% . **(TELLO WILLARD, 2013.)**.

Teniendo en cuenta que el objeto del proceso es obtener alcohol de una concentración máxima de 99,9% molar con bajos consumos energético, para ser considerado como carburante.

II. ANTECEDENTES

Las ideas sobre la producción de bioetanol como carburante en el Perú datan de entre 1998 y 2003, la producción de caña de azúcar en el Perú se incrementó a un ritmo de 5,8% por año, siendo producida totalmente en la costa, principalmente en la Libertad y Lambayeque. Una alternativa es la producción de etanol, que en el 2002 tuvo una demanda de aproximadamente 40 billones de litros, como combustible y aditivo de la gasolina, principalmente en los EEUU, los países de la UE y Asia. **(Ministerio de Agricultura y Riego, 2014)**

La demanda potencial de etanol a nivel nacional, para su uso como aditivo del 10% en la gasolina, se estima en 162 mil m³/año.

En nuestro País, existe un proyecto para producir Etanol para la región de San Martín. La meta de inversión es de US\$ 560 millones que está dividido en dos fases; Agrícola (US\$ 320millones) e Industrial (US\$ 240millones).

Para la ejecución se ha firmado un convenio entre Petro Perú y una corporación de empresas integradas por Natural Corp.(USA), Coler & Colantonio (USA) y Coimex (Brasil) para la producción de etanol anhidro.

El 31 de marzo de 2005 mediante D.S N° 013-2005 , se aprobó el Reglamento de la Ley 28054 de Promoción de Biocombustibles en el que se establece el Porcentaje 7.8% de etanol en las gasolinas que actualmente se viene aplicando progresivamente de acuerdo al cronograma indicado en el D.S N° 091-2009 –EM, que modifico al D.S N° 021-2007-EM, que establecía que desde el 01de Enero de 2010 todas las gasolinas se iba a mezclar con etanol, pero en el caso del biodiesel si se ésta cumpliendo con relación al 2% con el diesel y que se incrementará a 5% en el año 2011. **(Ministerio de Agricultura y Riego, 2014)**

Evolución de la Simulación de Procesos

En los primeros pasos, la simulación de procesos se basaba principalmente en circuitos analógicos.

Los programas de simulación de procesos empezaron a difundirse a partir de la cuarta generación de computadoras, que se caracterizó por la sustitución de las memorias de ferrita por circuitos integrados, cuando la velocidad de procesamiento alcanzada y los costos empezaron a ser atractivos para las industrias debido a su factibilidad de eficiencia y económicos, principalmente por la industria petroquímica.

En 1950 se inician las primeras aplicaciones de la programación lineal a la industria petroquímica en la creación de modelos que simulan la mezcla de gasolinas y de aceites. Los primeros programas fueron escritos inicialmente para grandes ordenadores VAX, IBM, etc. y gradualmente para ordenadores personales tipo IBM-PC o compatibles, reduciéndose su precio, **(Solé, 1989)**.

La teoría de sistemas nos muestra que diversos principios físicos tienen asociados modelos matemáticos equivalentes o isomórficos. Por ejemplo, ciertos circuitos eléctricos, circuitos hidráulicos, procesos de transferencia tanto de materia como energía y cantidad de movimiento, son descritos por el mismo conjunto de ecuaciones diferenciales.

Consecuentemente, podría resultar conveniente analizar (simular analógicamente) el comportamiento de un sistema (proceso químico) observando la evolución de las variables "equivalentes" en un circuito eléctrico (cuyo modelo sea equivalente al proceso estudiado), ya que son fácilmente cuantificables. **(Scenna, 1999)**.

Posteriormente, a partir del uso masivo de la computadora digital, y de la revolución que implica la informática en todos los campos de la ingeniería, se evolucionó lentamente de la simulación analógica a la digital, habiendo prácticamente desaparecido la simulación digital en muchas aplicaciones.

Con la aparición de los microprocesadores a partir de la década de los setenta, cuya consecuencia inmediata resultó ser la masificación de las computadoras, al introducirse comercialmente en los ochenta las computadoras personales (PC's), se produce una

revolución "informática", en el sentido de tener acceso prácticamente a bajo costo; tanto los profesionales como los estudiantes y docentes, a una computadora relativamente eficiente, hecho que anteriormente solo estaba permitido a pocas personas con acceso a centros de cómputos, cuyo costo de mantenimiento era elevado. En la actualidad los sistemas multimedia, las supercomputadoras y las "autopistas informáticas" representan el avance logrado, **(Scenna, 1999)**.

Como consecuencia de estos sucesos, se comienza a cubrir la brecha entre los métodos pre-computadora y los algoritmos numéricos programados aplicados a la ingeniería química. En el año 1974 aparece el primer simulador de procesos químicos, el FLOWTRAN, **(Scenna, 1999)**.

Existe actualmente una gran variedad de simuladores de procesos comerciales, de las cuales son poderosas herramientas de cálculo en procesos industriales, con enormes bases de datos y un fuerte respaldo de bibliotecas para cálculos de equipos y bibliotecas de modelos para cálculos termodinámicos, que le dan al simulador la ventaja de una gran versatilidad.

Ejemplos de estos simuladores de procesos de propósitos generales son:

Aspen Plus y Speedup (de Aspen Technology, USA), Pro II (de Simulations Sciences, USA), Hysys (de Hyprotech, Canada), Chemcad (de Chemstations, USA), etc.

Aspen Plus, Pro II y Chemcad son simuladores de procesos en estado estable, Speedup es un simulador de procesos dinámico y Hysys es útil para los dos tipos de simulación, **(Martínez, 2000)**.

Un aspecto muy importante en los simuladores de procesos, es la disponibilidad de propiedades termodinámicas y de transporte de las corrientes del proceso, estas propiedades son fundamentales para efectuar los balances de materia y energía al

grado de que si tenemos buenos datos o buenas correlaciones para las propiedades, entonces los resultados de la simulación serán altamente confiables.

Los simuladores modernos deben de permitir la selección de los modelos de propiedades termodinámicas adecuados para la naturaleza de los componentes químicos, estado de agregación y condiciones de operación. Las corrientes del proceso pueden ser:

1. Gases a baja y alta presión.
2. Soluciones líquidas con componentes no polares, polares y electrolitos a baja y alta presión.
3. Sólidos en suspensión o finamente divididos. **(Martínez, 2000)**

El desarrollo de la simulación de un proceso químico está conformado por una secuencia de etapas, las cuales son detalladas en el siguiente apartado.

EL BIOETANOL EN LA REGIÓN LORETO

En la región Loreto, actualmente se está percibiendo la posibilidad de construir plantas para la producción de bioetanol, por lo que existen proyectos gran magnitud, a pesar que el mercado de este producto, estarían asegurado, como es la refinería Iquitos.

En la selva existe alrededor de 2 millones de hectáreas potencialmente disponibles para la producción de caña de azúcar y/ o sorgo dulce, que son utilizadas para cultivos con poca rentabilidad o que en algunos casos no son explotados por razones económicas.

Ante este panorama se desarrolló un proyecto para la elaboración de bioetanol en el valle del Huallaga.

Dicho proyecto tiene como objetivo abastecer el mercado local, en un primer momento la selva; así como de exportar los excedentes de producción.

En abril del 2003, Petroperú y el consorcio encargado del proyecto conformado por las empresas Coler & Colantonio (EEUU), Naturel (EEUU) y Coimex (Brasil), firmaron un convenio mediante el cual la refinería de Iquitos compraría la producción de bioetanol del valle del Huallaga por diez años, a partir de julio del 2004.

Para ello se estableció que la siembra de la caña de azúcar se realizaría de forma escalonada, partiendo de la instalación de un semillero de 100 hectáreas de caña seleccionada. Adicionalmente se planeó la instalación de nuevas hectáreas según el siguiente cronograma:

- Primera Etapa : 1 080 hectáreas.
- Segunda Etapa : 32,4 mil hectáreas.
- Tercera Etapa : 150 mil hectáreas.

Asimismo se espera instalar nuevas plantas de molindas y destilerías para la producción de bioetanol carburante, con lo que se espera producir:

- Primera Etapa : 180 barriles/día de bioetanol.
- Segunda Etapa : 6,5 mil barriles/día de bioetanol.
- Tercera Etapa : 25 mil barriles/día de bioetanol.

Para transportar el bioetanol desde la Selva hasta la Costa, se construirá un alcoholducto desde el Valle del Huallaga hasta el Puerto de Bayóvar, con una longitud aproximada de 1 029 kilómetros.

La inversión calculada en dicho proyecto para los diez años es de US\$ 185 millones.

En nuestra región existen trabajos a nivel de tesis en simulación y estudios a nivel de prefactibilidad en la Facultad de Ingeniería Química como son:

CORNEJO, Miguel, (2006), Realiza el trabajo: Optimización de parámetros de operación de equipos, sistemas de generación y transporte de energía en la Refinería Iquitos.

LLERENA GONZALES, Tony (2009): Realiza trabajo sobre simulación, en la Universidad Nacional de la Amazonía Peruana, presentando como trabajo de Tesis: Modelado y Simulación de la Planta Piloto de Alcohol de la Facultad de Ingeniería Química.

NOLOBE MORENO, José (2011): Realiza trabajo sobre simulación, en la Universidad Nacional de la Amazonía Peruana, presentando como Tesis: “Modelado y Simulación de reactor químico con convección forzada”.

TELLO WILLARD, Pablo y Otros: Tesis: Estudio de Prefactibilidad para la Instalación de una planta industrial de bioetanol a partir de la caña de azúcar en la Región Loreto. Iquitos, 2013.

Es decir en nuestra región, no se tiene antecedente de trabajos sobre Simulación del proceso de obtención de bioetanol a partir de la caña de azúcar, ni de otra materia prima, solamente existe trabajo de tesis a nivel de Estudio de Prefactibilidad.

III. JUSTIFICACIÓN

El desarrollo del presente trabajo se justifica por lo siguiente:

1. Mejora la competitividad detectando ineficiencias motivada por la descoordinación entre secciones de una misma planta.
2. Anticipa lo que pasaría si cambiáramos variables como unidades a fabricar, operarios, maquinas, etc.
3. Informa de los costos reales por artículo, valorando el impacto real de cada lote dentro del total a fabricar.
4. Mejorar la competitividad de los egresados de la Facultad de Ingeniería Química.

Se escogió este trabajo, porque la simulación es una herramienta fundamental en el análisis de procesos. Permite estimar el comportamiento de un sistema real o de sus partes, mediante manipulación de su representación matemática o de su modelo físico.

Existen trabajos de simulación referentes a deshidratar bioetanol azeotrópico, con sustancias que tienen puntos de ebullición cercanos tanto al agua como al etanol, por lo que se tiene que emplear una destilación azeotrópica; también existen sustancias con puntos de ebullición muy alejados del compuesto azeotrópico, por lo que se tiene que aplicar el técnicas de deshidratación extractiva para obtener bioetanol carburante; asimismo existen métodos físicos, métodos de destilación reactiva, etc.

El trabajo trasciende porque, los balances de materia y energía, diseños de equipos, modificación del proceso, monitoreo permanente del proceso, se hacían a mano; posteriormente con la aparición de los simuladores, todo esto se hace en un terminal de computadora, mediante un software de simulación, lo que ahorra tiempos; para esto debe conocer las propiedades termodinámicas de las sustancias a emplear en cada equipo del proceso, lo que hace prácticamente imposible tener todos estos datos, por lo

que se emplean técnicas de predicción, para emplear en forma adecuada el modelo termodinámico.

El mercado potencial para el bioetanol carburante, es la Refinería Iquitos, beneficiándose toda la población de nuestra región; por disminuir la producción de dióxido de carbono al tener la gasolina un compuesto oxigenado como el bioetanol carburante. Por lo que sus ventajas ambientales son mayores con respecto a la situación actual.

El esquema tecnológico simulado que presente el menor costo, podría ser aplicado en la planta piloto de alcohol, de tal manera que se logre obtener un producto como el bioetanol carburante, que pueda agregarse a motores de combustión interna que utilicen gasolina, disminuyendo de esta forma la emisión de gases de efecto invernadero, al utilizar un compuesto oxigenado como es el bioetanol.

IV. OBJETIVOS

4.1 OBJETIVO GENERAL

Simular la deshidratación de bioetanol azeotrópico de la planta piloto de alcohol de la FIQ-UNAP, mediante la plataforma de Chemcad v.6.2.

4.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

1. Identificar las técnicas de deshidratación de bioetanol azeotrópico.
2. Seleccionar la técnica de deshidratación a emplear.
3. Analizar la técnica seleccionada.
4. Elaborar el diagrama de flujo de la técnica seleccionada.
5. Determinar las características físicas y químicas de la materia prima.
6. Elaborar el software aplicativo.
7. Ejecutar el software aplicativo.
8. Validar el sistema aplicado.

CAPÍTULO I

FUNDAMENTO TEÓRICO

1.1. DESTILACIÓN

La destilación es una operación unitaria que consiste en la separación de los componentes de una mezcla líquida (en la que todos los compuestos son más o menos volátiles) por evaporación y condensación sucesivas. La separación se basa en la diferencia de volatilidades absolutas de los componentes, lo que tiene como consecuencia la formación de un vapor de composición diferente a la del líquido del que procede.

Lógicamente, cuanto mayor sea la diferencia de volatilidades mayor será la separación que se puede conseguir. Para el cálculo de la composición del vapor que se desprende se supondrá que éste se encuentra en equilibrio con la fase líquida presente en cada instante.

Los distintos métodos empleados en la destilación se pueden clasificar del siguiente modo:

a) Destilación simple:

- Abierta.
- Intermitente o diferencial.
- Continua.
- Cerrada o de equilibrio.

b) Destilación con enriquecimiento de vapor:

- Repetida.
- Condensación parcial.
- Rectificación.
- Continua.

- Intermitente.

c) Destilación con arrastre de vapor.

En la destilación con enriquecimiento de vapor se consigue un vapor cuyo contenido en los componentes más volátiles del sistema es superior al que corresponde al equilibrio con el líquido en ebullición. En la destilación repetida esto se consigue mediante sucesivas condensaciones y destilaciones del vapor que se va generando. En la condensación parcial, el vapor generado en una destilación se pone en contacto con una superficie líquida a temperatura constante (más fría) durante el tiempo necesario para que alcance el equilibrio.

En la rectificación, el enriquecimiento del vapor se consigue a base de poner en contacto el vapor generado en una caldera, que asciende por una torre, con un reflujo procedente de devolver a la columna parte del destilado (líquido) que se recoge por el tope de ésta. El enriquecimiento del vapor se produce debido a que la composición en los componentes más volátiles del sistema es siempre superior a la del líquido en equilibrio con el vapor.

1.2. VALORES K Y VOLATILIDAD RELATIVA

$$K_i = \frac{\text{Fracción molar del componente } i \text{ en la fase vapor}}{\text{Fracción molar del componente } i \text{ en la fase líquida}} = \frac{y_i}{x_i} \quad (1.1)$$

El valor K es una medida de la tendencia del componente i a vaporizarse.

Si el valor K es alto, el componente tiende a concentrarse en el vapor; si es bajo, tiende a concentrarse en el líquido. Si el valor K es la unidad, el componente se dividirá igualmente entre el vapor y el líquido.

El valor K es una función de la temperatura, presión y composición. En el equilibrio, si se fijan dos de estas tres variables, se fija la tercera. Entonces el

valor K puede considerarse como una función de la presión y composición, o temperatura y composición (o temperatura y presión).

La volatilidad relativa de componentes i, j se define como:

$$\alpha_{ij} = \frac{\text{Valor } K \text{ del componente } i}{\text{Valor } K \text{ del componente } j} \quad (1.2)$$

Convencionalmente, la volatilidad relativa es definida como *la razón de los valores K del componente más volátil al menos volátil*, por lo cual la volatilidad relativa siempre será mayor o igual a la unidad.

La destilación es una técnica de separar componentes de acuerdo a su volatilidad relativa, la cual es una medida de la facilidad de separación y está dada por la razón entre la tendencia a vaporizar de dos componentes. Si la volatilidad relativa es alta, un componente tiene una tendencia mucho mayor a vaporizar (es más volátil) que el otro, y será fácil separarlos uno del otro mediante la vaporización de uno (destilación). De otro lado cuando la tendencia a vaporizar de los componentes es similar, la volatilidad relativa se acercará a la unidad y será difícil separar los componentes por destilación. Si la volatilidad relativa es la unidad, cada componente es tan volátil como el otro, y no pueden separarse por destilación.

Para un sistema binario, $y_2 = (1 - y_1)$, $x_2 = (1 - x_1)$, además de las Ec. (1.1) y (1.2) se tiene:

$$\alpha_{12} = \frac{K_1}{K_2} = \frac{y_1(1-x_1)}{x_1(1-y_1)} \quad (1.3)$$

$$y_1 = \frac{\alpha_{1,2}x_1}{1 + (\alpha_{1,2} - 1)x_1} \quad (1.4)$$

La Ec. (1.4) expresa la fracción molar del componente más volátil (CMV) en el vapor como una función de la fracción molar del CMV en el líquido y la volatilidad relativa. Esta relación se grafica en la Fig. 1.1

La Fig. 1.1a es una gráfica llamada **diagrama x – y**. Los ejes x e y muestran la concentración del CMV en el líquido y en el vapor respectivamente. La diagonal de 45° representa puntos a los cuales las composiciones del vapor y el líquido son las mismas. La curva de la Fig. 1.1a es una relación de equilibrio. La Fig. 1.1a muestra como el **CMV** se concentra en el vapor. Una mezcla líquida conteniendo una fracción molar x_1 de **CMV** ($x_1 = 0,45$ en la Fig. 1.1a) está en equilibrio con un vapor conteniendo una fracción molar y_1 de **CMV** ($y_1 = 0,71$ en Fig. 1.1a) si este vapor es recogido y condensado se obtiene una mezcla en la cual la fracción molar de CMV se ha enriquecido de 0,45 a 0,71 La Fig. 1.1b ilustra el efecto de la volatilidad relativa sobre la tendencia del **CMV** para concentrarse en el vapor. Cuando la volatilidad es alta, el enriquecimiento es grande.

Por ejemplo cuando la volatilidad relativa es 10, una mezcla líquida conteniendo una fracción molar de 0,45 de **CMV** está en equilibrio con vapor conteniendo una fracción molar de 0,88 de CMV; esto deberá requerir solo unas cuantas etapas para convertir la mezcla líquida en componentes puros. Contrariamente, cuando la volatilidad relativa es muy baja tal como 1,1 una mezcla líquida conteniendo una fracción molar de 0,45 del **CMV** está en equilibrio con vapor conteniendo una fracción molar de 0,47 del **CMV**. Bajo estas condiciones, se necesita un número grande de etapas para separar la mezcla en los componentes puros.

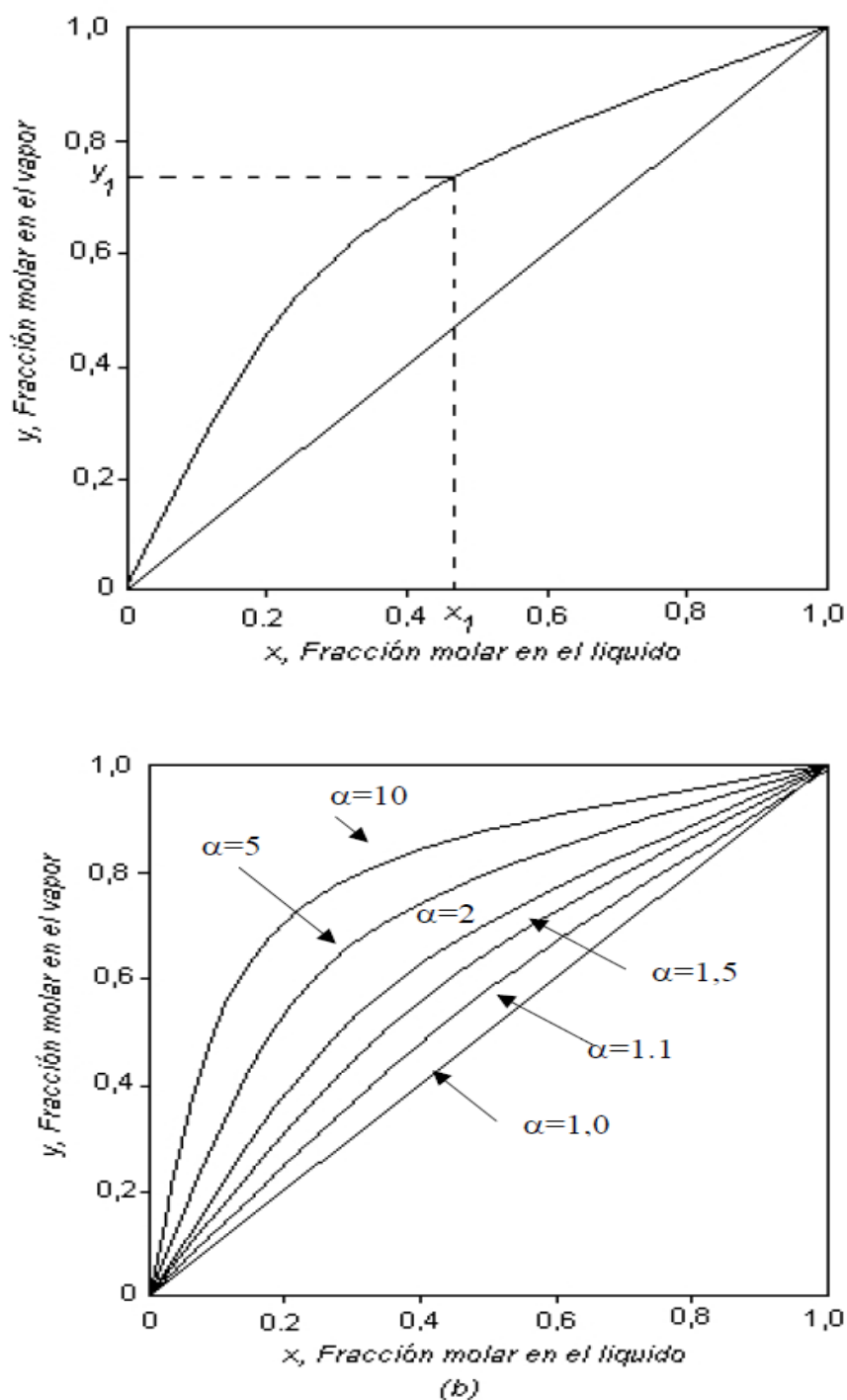


Fig. 1.1 Concepto de volatilidad relativa. (a) concentración del componente más volátil CMV en el vapor. (b) efecto de la volatilidad relativa sobre la concentración del CMV en el vapor.

Fuente.- Manual del Ingeniero químico Perry.2001

1.3. SISTEMAS IDEALES Y NO IDEALES

Un sistema ideal es aquel donde el vapor obedece la ley del gas ideal y el líquido obedece la ley de Raoult.

Una mezcla ideal de gases obedece la ley de Dalton:

$$p_i = y_i P \quad (1.5)$$

Una solución ideal obedece la ley de Raoult, la cual establece que la presión parcial de un componente en la solución es igual al producto de su fracción molar y la presión de vapor del componente puro, luego:

$$p_i = x_i P_i^1 \quad (1.6)$$

A partir de las ecuaciones (1.5) y (1.6), y la definición de los valores de K, se obtiene:

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} = \frac{P_i^1}{P} \quad (1.7)$$

Para sistemas no ideales, la fugacidad del componente i en el vapor y en el líquido juega el mismo rol que la presión parcial del componente en el vapor y la presión de vapor del componente en el líquido. La fugacidad puede ser considerada como una presión termodinámica. En el equilibrio, la fugacidad del vapor es igual a la fugacidad del líquido

$$f_i^V = f_i^L \quad (1.8)$$

La fugacidad del vapor puede definirse como una presión parcial corregida, dada por la ecuación

$$f_i^v = \Phi_i^v (P y_i) \quad (1.9)$$

Igualmente, la fugacidad del líquido puede definirse como una presión de vapor corregida, dada por

$$f_i^L = \phi_i^L \gamma_i \psi_i (x_i P_i^0) \quad (1.10)$$

Dónde:

ϕ_i^V : Coeficiente de fugacidad del vapor. Explica el efecto de la no-idealidad del vapor sobre la fugacidad del mismo. Es usualmente estimado a partir de una ecuación de estado y está basado en la temperatura, presión y fracción molar del sistema.

ϕ_i^L : Coeficiente de fugacidad del líquido. Explica el efecto de la no-idealidad del vapor sobre la fugacidad del líquido. Este coeficiente es estimado de manera similar al coeficiente de fugacidad del vapor, pero está basado en la temperatura del sistema y en la presión de vapor del componente puro.

ψ_i : Factor de corrección de Poyting. Explica el efecto de la presión sobre la fugacidad del líquido. Como ϕ_i^L es evaluado a la presión de vapor del componente puro, ψ_i es usado para corregir la diferencia entre la presión de vapor del componente puro y la presión de la mezcla. Este efecto es pequeño y puede ser despreciado a bajas presiones, pero es importante a presiones altas.

γ_i : Coeficiente de actividad del líquido. Corrige la fugacidad del líquido para los efectos de composición. Este valor depende de cuan similar sean los componentes. Para dos componentes similares, tal como una mezcla de i-butano y n-butano, el coeficiente de actividad del líquido es cercano a la unidad. Si los componentes son diferentes, el coeficiente de actividad se desvía de la unidad.

Combinando las **Ecuaciones. (1.1), (1.8), (1.9) y (1.10)** se tiene

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} = \frac{\phi_i^L}{\phi_i^V} = \gamma_i \psi_i \frac{P_i^0}{P} \quad (1.11)$$

1.4. EFECTO DE LA TEMPERATURA, PRESIÓN Y COMPOSICIÓN SOBRE LOS VALORES $-K$ Y LA VOLATILIDAD

La Ec. (1.11) se simplifica omitiendo el factor de corrección de Poyting, el cual es usualmente pequeño a bajas presiones. Combinando la Ec. (1.11) con la definición de volatilidad relativa, Ec. (1.2) se tiene:

$$\alpha_{ij} = \frac{K_i}{K_j} = \phi_r \gamma_r \frac{P_r^0}{P_j} \quad (1.12)$$

Dónde:

$$P_r^0 = \frac{P_i^0}{P_j} \quad (1.13)$$

$$\gamma_r = \frac{\gamma_i}{\gamma_j} \quad (1.14)$$

$$\phi_r = \frac{\phi_i^L \phi_j^V}{\phi_i^V \phi_j^L} \quad (1.15)$$

El valor más importante en las ecuaciones para los valores- K y la volatilidad relativa es el término de la presión de vapor.

1.4.1. EFECTO DE LA TEMPERATURA Y PRESIÓN. La presión de vapor se incrementa con la temperatura. Por esta razón, el valor- K para cada componente se incrementa linealmente con la temperatura.

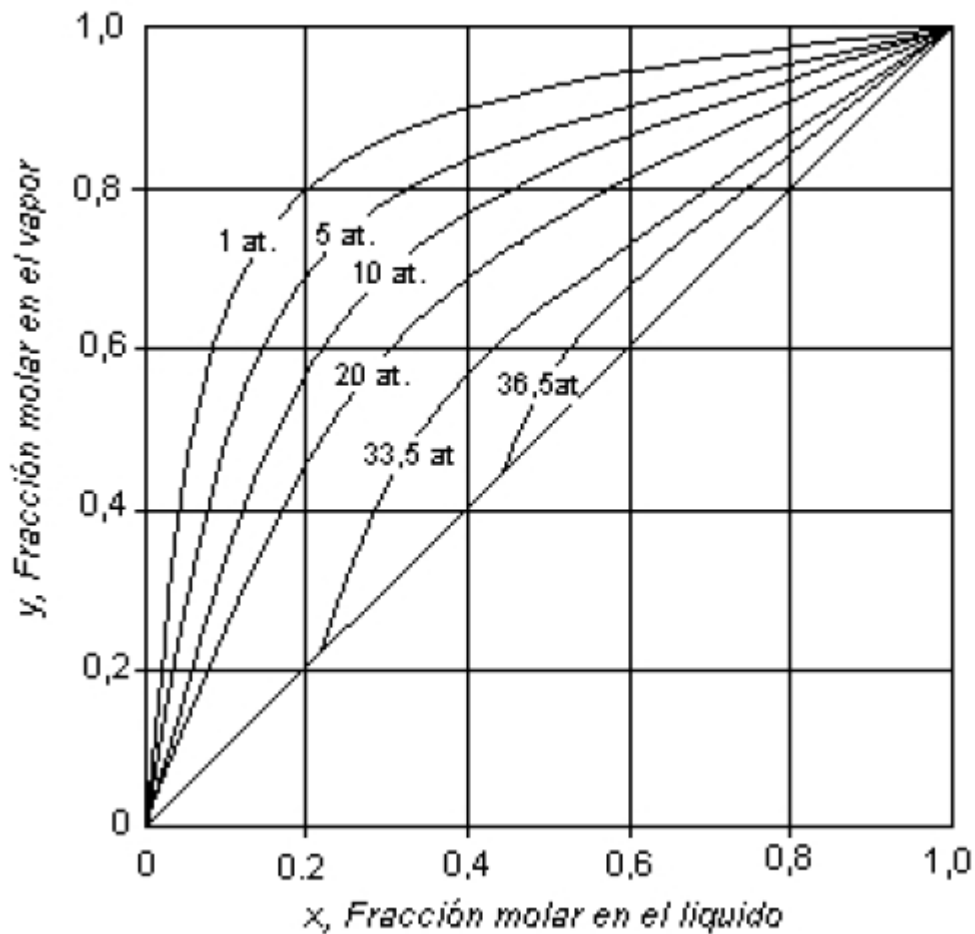


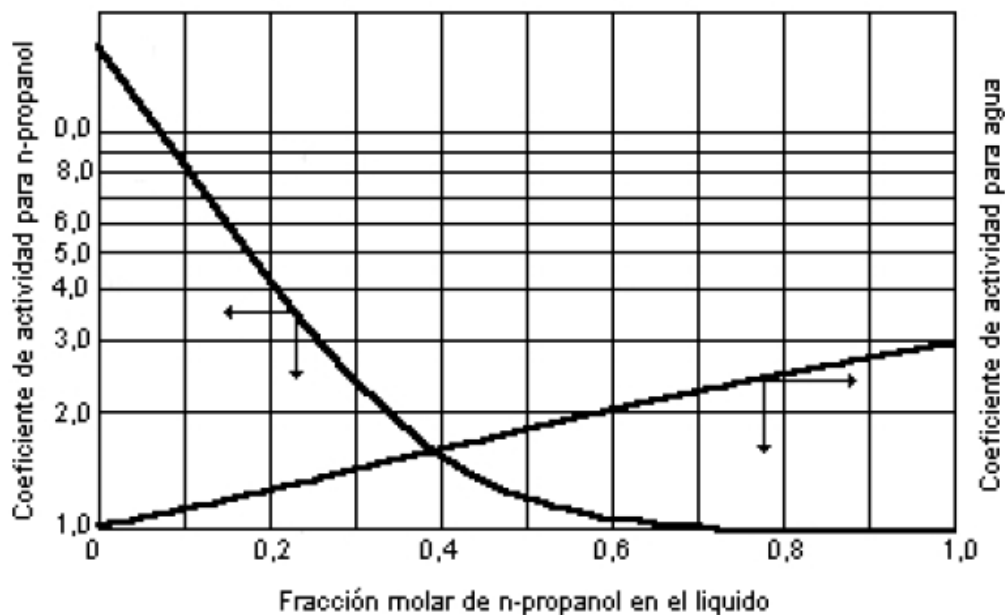
Fig. 1.2 Efecto de la presión y temperatura sobre los valores-K
Fuente.- Manual del Ingeniero químico Perry.2001

En general para miembros de una serie homologa, la presión de vapor del componente menos volátil se incrementa más rápido con la temperatura que la presión de vapor de los componentes más volátiles. Esto causa que $0 r P$ en la Ec. (1.13) disminuya a medida que se incrementa la temperatura. Así, se alcanza un punto crítico cuando $0 r P$ se aproxima a la unidad. Aplicando la Ec. (1.12), la volatilidad relativa disminuye a medida que la temperatura aumenta, hasta que esta se aproxime a la unidad a medida que se alcanza el punto crítico.

Para componentes que no son miembros de una serie homologa, puede ocurrir lo contrario de lo visto anteriormente sobre un rango de temperatura, sin embargo si la temperatura se incrementa por sobre este rango aparecerá el punto crítico de la mezcla.

El efecto de la temperatura (o presión) sobre la volatilidad relativa se ilustra en la Fig. 1.2. Este diagrama muestra claramente una reducción en la volatilidad relativa a medida que la presión aumenta, e ilustra que la volatilidad relativa de la mezcla se aproxima a la unidad a medida que se alcanza el punto crítico de la mezcla.

1.4.2. EFECTO DE LA COMPOSICIÓN. El principal efecto de la composición sobre los valores- K y las volatilidades relativas es un resultado del efecto de la composición sobre el coeficiente de actividad del líquido. La composición también tiene un efecto sobre el coeficiente de fugacidad el último efecto es generalmente pequeño a presiones bajas.



(a)

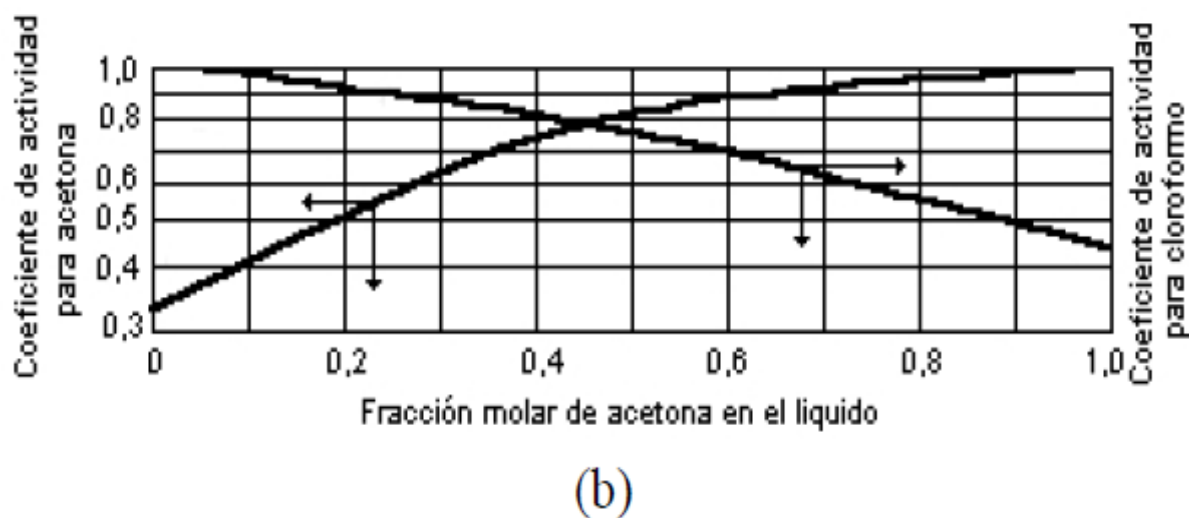


Fig. 1.3 Efecto de la composición sobre los coeficientes de actividad del líquido. (a) Para sistemas con desviación positiva n-propanol agua a 1 atm; (b) para sistemas con desviación negativa acetona-cloroformo a 1 atm.

Fuente.- *Manual del Ingeniero químico Perry.2001*

Los coeficientes de actividad son clasificados de acuerdo a la naturaleza de su desviación de la Ley de Raoult. Esto depende del calor de mezcla de los componentes. Si se necesita adicionar calor a la mezcla para conseguir la solución “el componente prefiere estar solo” antes que en solución, la desviación es positiva (Fig. 1.3a). Las desviaciones positivas dan coeficientes más grandes que la unidad y valores $-K$ más grandes que los predecidos a partir de ley de Raoult. Si se desprende calor de la solución, se aplica lo contrario (Fig. 1.3b); las desviaciones son negativas y los valores $-K$ son menores que los obtenidos por la Ley de Raoult.

La magnitud de las desviaciones de la ley de Raoult se incrementa con la diferencia de la naturaleza de los componentes. Por lo tanto el sistema de n-propanol y agua (Fig. 1.3a) y el sistema acetona-cloroformo (Fig. 1.3b) muestran grandes coeficientes de actividad siendo el más alto. De otro lado, el coeficiente de actividad más alto en una mezcla de i-butano y n-butano los cuales son similares uno del otro, es menor que 1,1 (a alrededor de 100 psi).

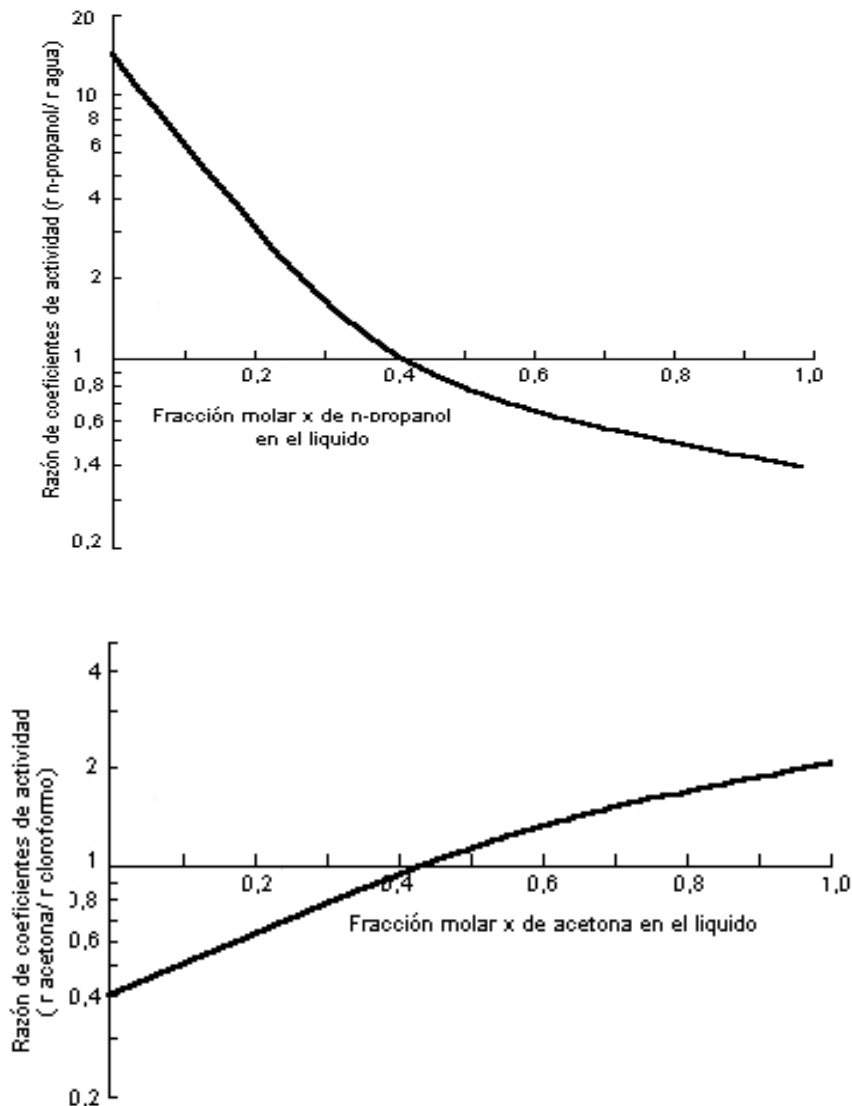


Fig. 1.4 Razones de coeficientes de actividad (a) en sistema con desviación positiva N-propanol-agua; (b) en sistema con desviación negativa, acetona cloroformo.

Fuente.- Manual del Ingeniero químico Perry.2001

Las Figs. 1.4a y 1.4b muestran los efectos de la composición sobre la razón de los coeficientes de actividad. De acuerdo a la Ec. 1.12, esta razón representa el principal efecto de la composición sobre la volatilidad relativa. Cuando un sistema muestra desviación positiva, la volatilidad relativa disminuye a medida que la concentración del CMV se incrementa. Lo contrario se aplica para sistemas con desviación negativa.

A bajas presiones ϕ_i se puede tomar como 1 y omitiendo el factor de corrección de Poyting, las Ecuaciones. (1.11) y (1.12) se pueden escribir:

$$K_i = \gamma_i \frac{P_i^0}{P} = \frac{y_i}{x_i} \quad (1.16)$$

$$\alpha_{ij} = \frac{K_i}{K_j} = \frac{\gamma_i P_i^0}{\gamma_j P_j^0} \quad (1.17)$$

La validez de estas ecuaciones en el diseño de columnas operando por sobre unos cuantos bars de presión dependerá de la naturaleza de los componentes en la mezcla y de la dificultad de la separación. En la fase vapor, las desviaciones de la Ley de gas ideal se pueden evaluar mediante la determinación del factor de compresibilidad. La dificultad de la separación dependerá de la cercanía de los valores $-K$ de los componentes. Las Ecuaciones (1.16) y (1.17) son adecuadas para el diseño de separaciones relativamente fáciles, por decir menos que 50 etapas, pero no se deben usar para separaciones difíciles. A presiones moderadas, alrededor de 20 bars, las desviaciones de las leyes de mezcla ideal en la fase gas son despreciables,

1.5. DIAGRAMAS DE FASE

Los diagramas de fase son usados para describir sistemas binarios graficando dos de las tres variables (composición, temperatura, y presión) a un valor constante de la otra. Las más populares de estas gráficas son los diagramas **T-x** y **x-y**.

1.5.1. DIAGRAMAS TEMPERATURA-COMPOSICIÓN (T-X) (Fig. 1.5). La curva ABC muestra la relación composición-temperatura para el líquido saturado. A temperatura T_1 y composición de líquido x_1 , el punto B es la condición a la cual el líquido está listo para iniciar la ebullición. El punto B es definido como *el punto de burbuja*.

Cuando el líquido comienza a hervir a temperatura T_1 (punto B), el primer vapor formado tiene una composición y_1 y está por consiguiente a su punto de rocío. En este punto, el vapor es rico en componente ligero. A medida que la temperatura se incrementa, se evapora más componente pesado. La cantidad de vapor formado se incrementa, pero la fracción molar de componente ligero en el vapor y el líquido disminuye. A temperatura T_2 , la composición del líquido es x_2 y la composición del vapor y_2 . Algo de la carga inicial es ahora vapor y algo líquido. Un posterior incremento de la temperatura a T_3 vaporizará el resto de líquido. La composición del vapor será ahora x_1 , y la última gota de líquido vaporizado tendrá una composición x_3 . El líquido siempre se moverá a través de su curva de punto de burbuja (BEH) mientras que el vapor se moverá siempre a través de su curva de punto de rocío (DFG). Entonces, en destilación el punto de burbuja del líquido está siempre en equilibrio con el punto de rocío del vapor.

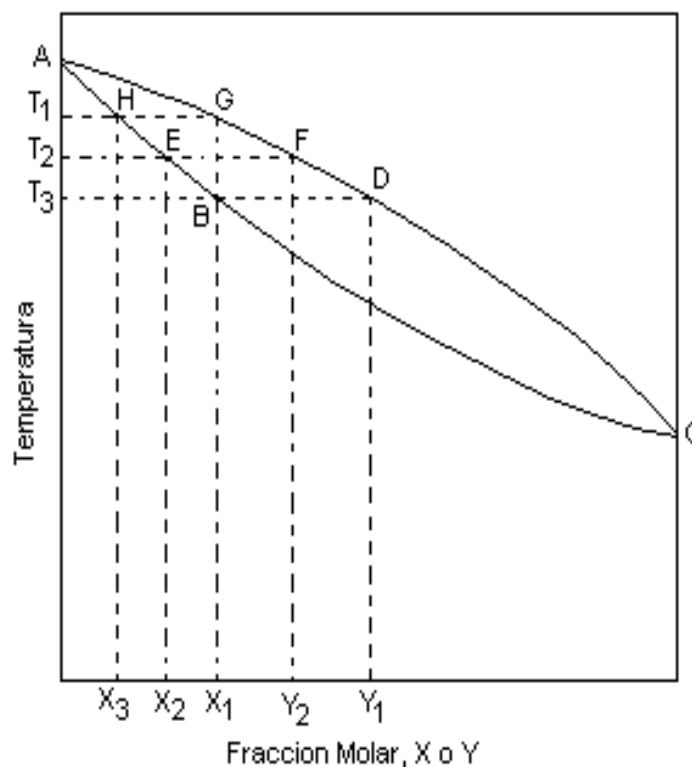


Fig. 1.5 Diagrama temperatura composición

Fuente.- Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química. Van Ness1997

1.6 AZEÓTROPAS

Según Van Ness describe diversos tipos de azeótropas.

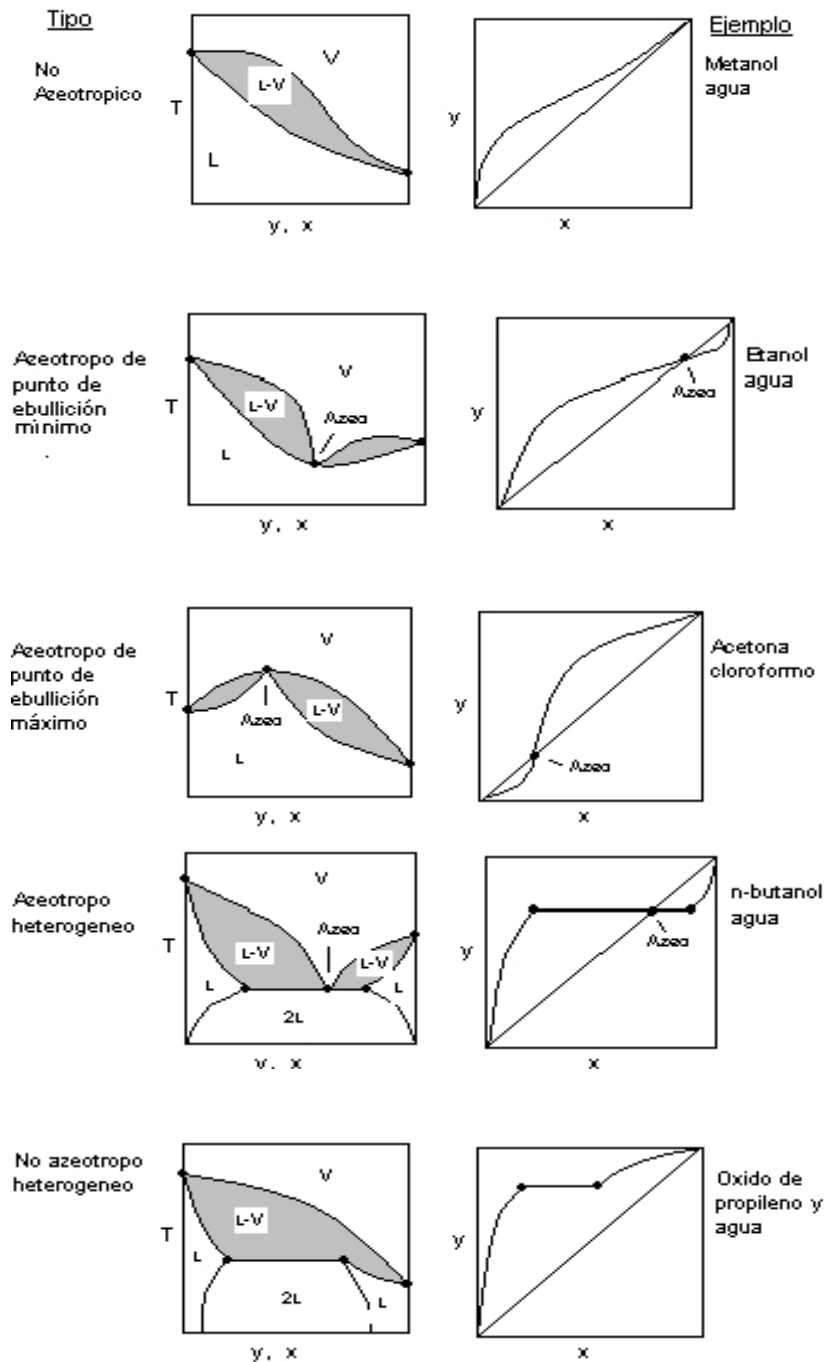


Fig. 1.6 Tipos comunes de diagramas de equilibrio para sistemas binarios

Fuente.- Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química. Van Ness1997

Las Figuras 1.1 y 1.5 son diagramas de fases para sistemas “normales”. En tales sistemas, a medida que la concentración del componente menos volátil se incrementa así lo hacen el punto de rocío y el punto de burbuja.

Si los componentes exhiben fuerte interacción física o química, los diagramas de fases pueden ser diferentes de los mostrados en las Figs. 1.1 y 1.5 y más claramente son mostrados en la Fig. 1.6. En estos sistemas existe una composición crítica (el punto de intersección de la curva de equilibrio con la diagonal de 45°) para el cual las composiciones del vapor y el líquido son idénticas. Cuando se alcanza esta composición del vapor y el líquido, los componentes no pueden ser separados a la presión dada. Tales mezclas son denominados azeótropos.

Un azeótropo de punto de ebullición mínimo, hierve a temperatura menor que cualquiera de los componentes puros. Cuando se destila un sistema de estos componentes, el producto del tope es el azeótropo. El producto del fondo es el componente de mayor punto de ebullición cuando el CMV está presente a concentraciones bajas. De otro lado, cuando el componente de menor punto de ebullición está presente a altas concentraciones, el producto del fondo es el CMV.

Un azeótropo de punto de ebullición máximo hierve a temperatura mayor que la de los componentes puros y por lo tanto siempre sale por el fondo de la columna. El producto del tope es el componente de más alto punto de ebullición cuando el CMV está en concentraciones bajas. El producto del tope es el CMV cuando este está a altas concentraciones.

Si ocurre una separación en fase líquida, la temperatura de ebullición de la mezcla así como la composición de la fase vapor permanece constante hasta que una de las fases de líquido desaparece. Bajo tales condiciones, una mezcla de dos

líquidos saldrá por el tope de la columna mientras que otra saldrá por el fondo, dependiendo de la composición.

1.7. COLUMNA DE DESTILACIÓN DE MULTICOMPONENTES NO IDEAL

En una destilación multicomponente, no ideal, con flujos no equimolares, y platos ineficientes. Asumiremos lo siguiente:

- ✓ El líquido sobre el plato es incompresible y está perfectamente mezclado.
- ✓ Las retenciones de vapor son despreciables.
- ✓ Las dinámicas del condensador y rehervidor son despreciables.
- ✓ El vapor y el líquido están en equilibrio térmico (la misma temperatura) pero no en equilibrio de fases. Se utiliza la eficiencia de Murphree para describir la desviación del equilibrio.

1.8. PROCESOS DE DESHIDRATACIÓN DE BIOETANOL

1.8.1. DESTILACIÓN AL VACÍO

Es una de las primeras técnicas utilizadas para eliminar el azeótropo etanol-agua, aprovechando el efecto conseguido al disminuir la presión del sistema y así obtener bioetanol carburante. En la actualidad ha sido desplazada por técnicas de destilación que utilizan agentes de separación.

El sistema para obtener bioetanol carburante consta de dos columnas consecutivas; en la primera se alimenta una solución diluida para llevarla hasta una composición cercana a la azeotrópica y luego ésta se lleva a la segunda columna, donde se hace vacío para deshidratar el bioetanol y obtener una composición por encima del 99% en volumen.

El incremento de la relación de reflujo y el número de etapas requerido para la separación no tiene influencia marcada sobre la eficacia de la misma, de tal manera que para obtener un producto de alta pureza es necesario utilizar columnas de deshidratación con un gran número de etapas (por encima de 40) y con altas relaciones de reflujo, incurriendo en elevados consumos energéticos y altos costos de construcción de la torre (diámetros elevados). En la Figura 1.7 se presenta un diagrama esquemático del proceso.

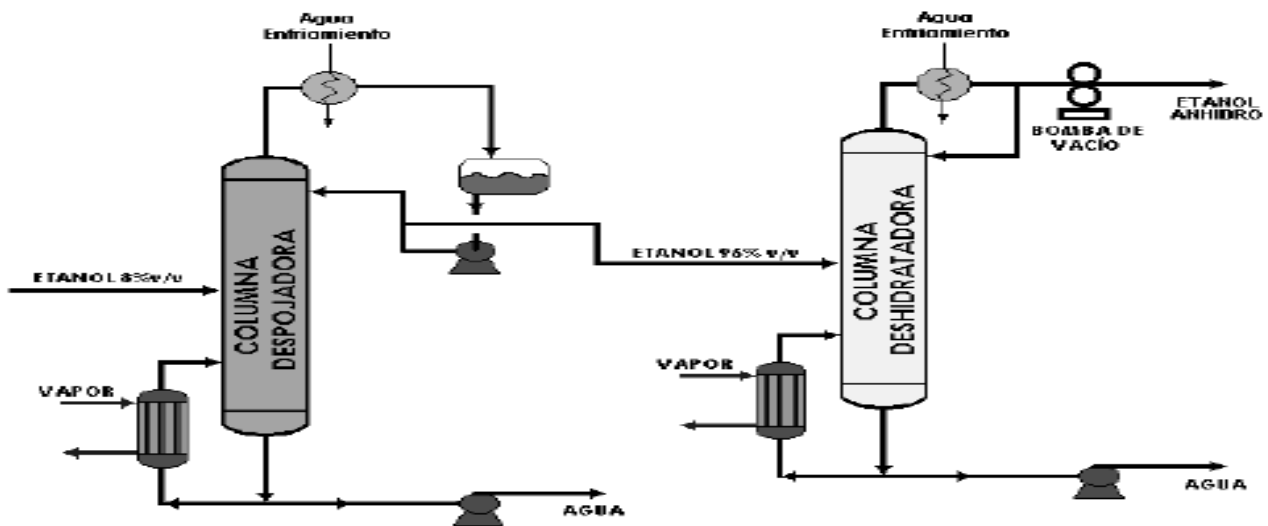


Fig. 1.7: Columna de destilación al vacío.

Fuente.- Deshidratación del etanol. A.M. Uyazán 2004

1.8.2. DESTILACIÓN AZEOTRÓPICA

En los sistemas de destilación azeotrópica se aprovecha la adición de un agente de separación que modifique la condición de azeotropía de la mezcla a una más favorable.

Los agentes de separación que inducen la formación de dos fases líquidas (mezclas heterogéneas) se utilizan para separar mezclas azeotrópicas. La

efectividad de tales agentes está en el aprovechamiento de la separación de fases para lograr que la composición del alimento se encuentre en una región favorable para la operación de la columna.

El agente de separación se selecciona con criterios económicos, de baja toxicidad, de eficiencia en la separación y de conservación de energía. El pentano y el ciclohexano han demostrado tener los mejores rendimientos desde el punto de vista del consumo energético; sin embargo, industrialmente son muy utilizados el benceno y el dietil-éter. El pentano es muy volátil y por lo tanto las pérdidas por evaporación son considerables, situándolo en desventaja con relación a otros agentes de separación. El benceno, que se utilizó durante muchos años, ha perdido aceptación por su toxicidad, impidiendo la aplicación del bioetanol obtenido con fines farmacéuticos y alimenticios, y obligando a que algunas de las plantas existentes cambiaran de tecnología para la producción de bioetanol carburante.

El sistema de deshidratación consta de tres columnas; al igual que en la destilación al vacío, la primera se utiliza para concentrar la solución alcohólica hasta un punto cercano al azeotrópico. La segunda, conocida como *deshidratadora* y en la que se alimenta un agente de separación, permite obtener como producto de tope un azeótropo heterogéneo que arrastra el agua y que se condensa para llevarlo luego a un decantador, en el que se produce una separación de fases y se hace la reposición del agente de separación. La fase liviana constituye la mayor parte de la corriente de reflujo de la columna y la fase pesada se envía como corriente de destilado a una columna de recuperación de benceno; una parte de la fase pesada se utiliza como reflujo en algunas ocasiones para ajustar parámetros en la columna. Como producto de fondos de la columna deshidratadora se obtiene bioetanol carburante. En esta columna el consumo típico de vapor es de 1,5 kg por cada litro de bioetanol carburante producido, con una presión entre 102 y 171 kPa (15 y 25 psi).

La tercera columna, conocida como *recuperadora*, se alimenta con la fase acuosa del azeótropo formado para retirar el solvente remanente y devolverlo a la columna de deshidratación. En esta columna el consumo típico de vapor es de 0,78 kg por cada litro de bioetanol carburante producido. En la Figura 1.9 se presenta un diagrama esquemático del proceso. Para separar una mezcla binaria homogénea de etanol y agua, que forma un azeótropo de mínimo punto de ebullición, se puede utilizar benceno como agente de separación, el cual tiene miscibilidad parcial con el agua y conduce a la formación de tres azeótropos de mínimo punto de ebullición, dos binarios y uno ternario. El mapa de curvas residuales de este sistema se generó en el simulador Aspen Plus con el modelo Uniquac y se ilustra en la Figura 1.8, en el cual se distinguen tres regiones de destilación.

Para separar el bioetanol se requiere que la composición de alimento (x_F) se encuentre en la región II (Figura 1.8). Esto se consigue mezclando el alimento azeotrópico binario de composición x_{F1} con una corriente de agente de separación, que generalmente se obtiene de una columna de regeneración posterior. Las especificaciones de diseño de la columna son: la composición de fondos (x_B), etanol básicamente puro y la composición del vapor del producto de tope (y_N), la cual se ubica dentro de la región de dos fases, cerca al azeótropo ternario y dentro de la región II de destilación. El diseño de la columna es tal que en estado estacionario el perfil de composición en la fase líquida va desde x_B hasta x_N y por lo tanto todas las etapas de la columna se encuentran en la fase homogénea, correspondiente a la región II de destilación.

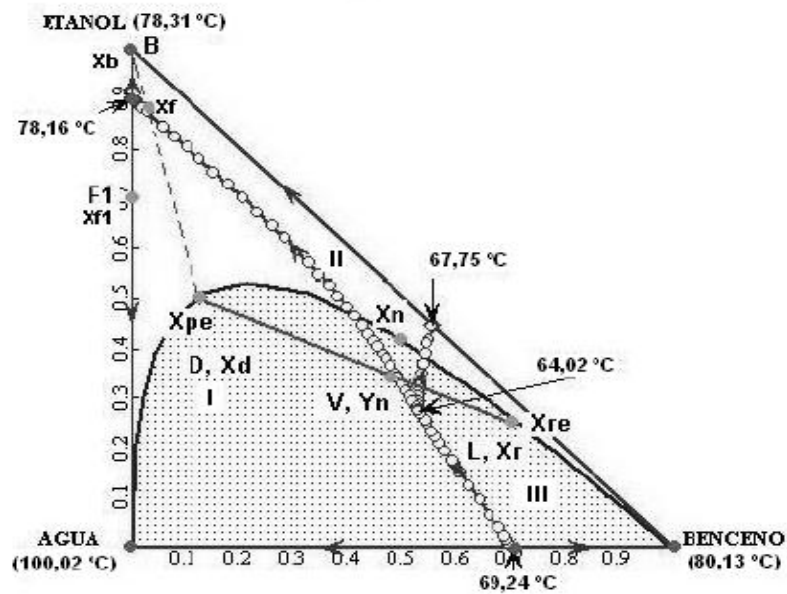


Fig. 1.8: Mapa de curva residual

Fuente.- Deshidratación del etanol. A.M. Uyazán 2004

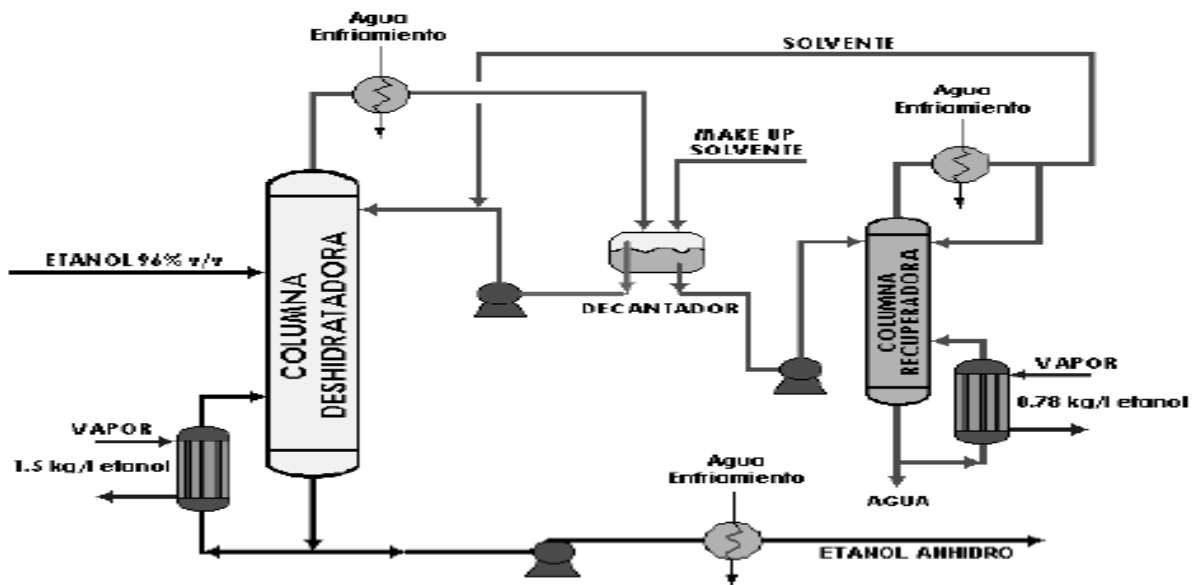


Fig. 1.9: Destilación azeotrópica

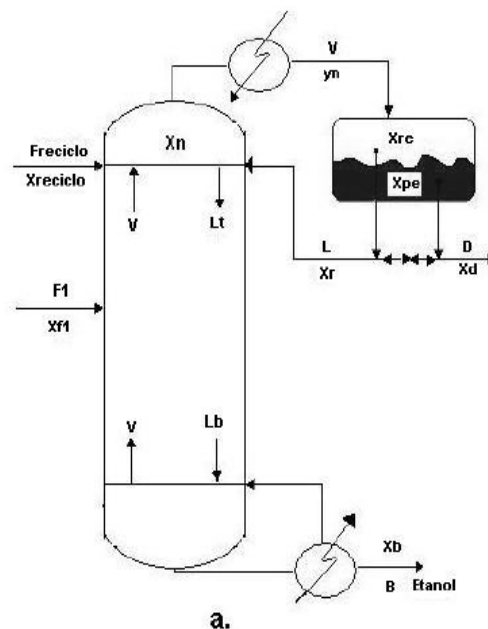
Fuente.- Deshidratación del etanol. A.M. Uyazán 2004

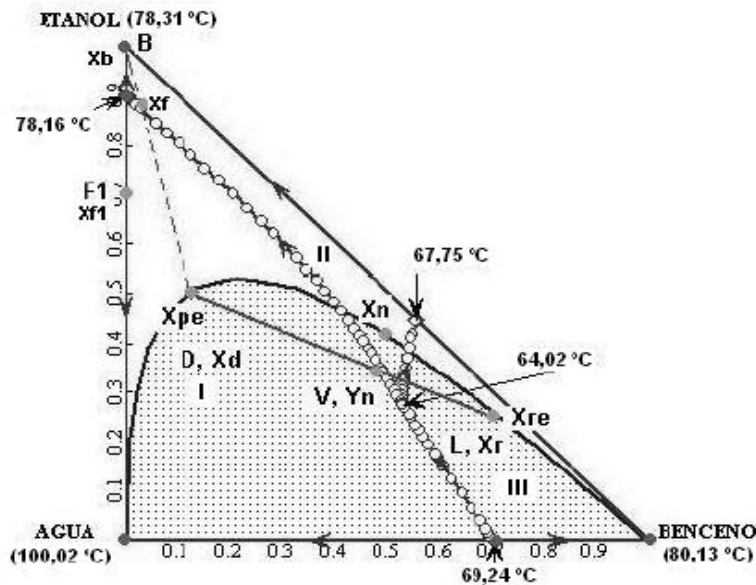
El vapor de tope de composición y_N , se condensa totalmente en dos fases líquidas en equilibrio: una fase liviana, rica en benceno de composición x_{re} , y una fase pesada, pobre en benceno de composición x_{pe} . La separación de fases en el

decantador permite cruzar de una región de destilación a otra, haciendo que la mezcla del reflujo y el solvente recirculado formen un líquido de composición x_N en la parte superior de la columna.

1.8.3. DESTILACIÓN EXTRACTIVA.

La destilación extractiva es un método de separación de azeótropos binarios de mínimo punto de ebullición, y ocurre en presencia de una sustancia de alto punto de ebullición, llamada solvente, la cual es completamente miscible con los componentes de la mezcla binaria en todas las proporciones y no forma azeótropos adicionales. El solvente se adiciona a la mezcla azeotrópica de alimentación para alterar las volatilidades relativas de los componentes de la mezcla; debido a su baja volatilidad éste tiende a permanecer en la fase líquida, razón por la cual se alimenta en una de las etapas superiores para que su efecto sea aprovechado a lo largo de toda la columna.





b.

Figura 1.10. (a) Representación esquemática de la columna de destilación. (b) Líneas de balance de materia para la separación de la mezcla etanol-agua con benceno.

Fuente.- Deshidratación del etanol. A.M. Uyazán 2004

La destilación extractiva es ampliamente usada en las industrias de procesos químicos y petroquímicos para la separación de sistemas azeotrópicos, cuyos puntos de ebullición son muy cercanos. Así mismo, tiene aplicación en la separación de componentes que contienen uno o más grupos funcionales, pero es dispendiosa para la separación de estereoisómeros, series homólogas o isómeros estructurales.

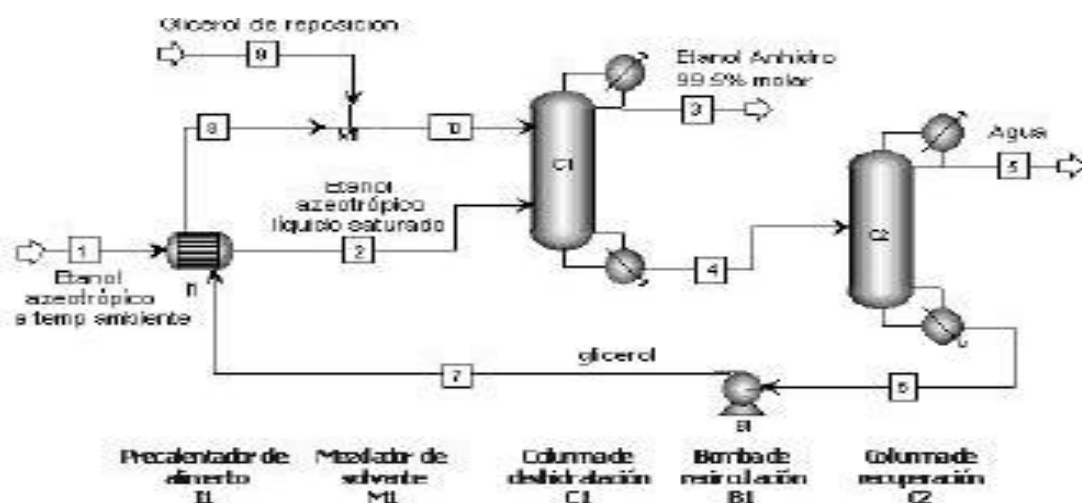


Figura 1.11. Diagrama esquemático de la destilación extractiva con solvente.

Fuente.- Deshidratación del etanol. A.M. Uyazán 2004

Cuando el agente de separación es una sustancia líquida se denomina *solvente*. La selección de los solventes de destilación extractiva implica un estudio para determinar su efectividad, la cual está representada por las modificaciones que produce sobre las no idealidades de la fase líquida de los componentes a separar.

El proceso se hace posible cuando el solvente altera de manera selectiva los coeficientes de actividad; para que esto ocurra es necesaria una alta concentración de solvente. Las características más importantes de un solvente son:

Debe afectar el comportamiento de la fase líquida de los componentes claves.
Debe tener un punto de ebullición superior al de los componentes a separar y ser relativamente no volátil, para asegurar su permanencia en la fase líquida.

No debe formar azeótropos con los componentes de la mezcla a separar.

Debe tener baja viscosidad, baja toxicidad y bajo costo.

La deshidratación o recuperación completa del bioetanol a partir de soluciones acuosas por este método ha sido estudiada durante muchos años. Una gran variedad de solventes que modifican la forma de la curva del equilibrio líquido-vapor y eliminan el azeótropo ha sido evaluada; entre dichos solventes se encuentran algunos glicoles, aminas, fenoles hidrofóbicos, parafinas, tiofenos y otros. La adición de glicoles como solvente extractivo no solo elimina el azeótropo bioetanol-agua sino que también cambia la forma de la curva de equilibrio líquido-vapor en la zona rica en bioetanol. Además, la efectividad del agente extractivo depende del incremento que produzca en la volatilidad relativa del bioetanol o del agua. Dado que la presión de vapor del bioetanol es aproximadamente 2.5 veces mayor que la del agua, resulta conveniente utilizar un agente de extracción hidrofílico que reduzca el coeficiente de actividad del agua y si es posible,

incremente el coeficiente de actividad del bioetanol; y que además, tenga baja viscosidad y toxicidad.

1.8.4. ADSORCIÓN CON TAMICES MOLECULARES

Los tamices moleculares son sustancias granulares de forma cilíndrica o esférica denominadas zeolitas, que pueden ser naturales o fabricadas a partir de aluminosilicatos de potasio. Son identificados de acuerdo con el tamaño nominal de los poros internos, cuyo diámetro generalmente es medido en angstroms. Los tamices moleculares son materiales que se caracterizan por su excelente capacidad para retener sobre su superficie tipos definidos de especies químicas. Estas especies son por lo general solventes (agua en la mayoría de las veces), que se desean retirar de una mezcla para la obtención de un producto final con unas especificaciones dadas. Una de las características esenciales en las operaciones que involucran la acción de los tamices moleculares es que la cantidad de la sustancia a remover por medio del tamiz debe ser baja. Una zeolita sintética del tipo 3,0 se utiliza en la gran mayoría de los deshidratadores de bioetanol, debido a que sus poros tienen un diámetro de 3,0 mientras que las moléculas de agua tienen un diámetro de 2,8 y las moléculas de bioetanol tienen un diámetro de 4,4. De esta manera, las moléculas de agua son atraídas fuertemente dentro de los poros y las moléculas de bioetanol pasan a través del lecho sin experimentar atracción alguna.

El proceso de separación por tamices moleculares puede operar en fase líquida o fase vapor. En la operación en fase líquida se utiliza gase caliente para la regeneración del lecho de tamiz, lo que conduce a un deterioro acelerado del tamiz del choque térmico.

La regeneración (que no es otra cosa que la remoción del agua adsorbida sobre la matriz) se lleva a cabo haciendo pasar una corriente de gas caliente (N_2 o CO_2),

a través del lecho del tamiz molecular. Este gas debe ser químicamente inerte, de alta pureza, con una presión cercana a 200 psi y no debe contener oxígeno o aire. La operación en fase vapor permite alargar la vida promedio del tamiz hasta por 10 años, ya que la regeneración se hace recirculando parte de los vapores de bioetanol carburante sobrecalentado al lecho, con el fin de retirar la humedad acumulada.

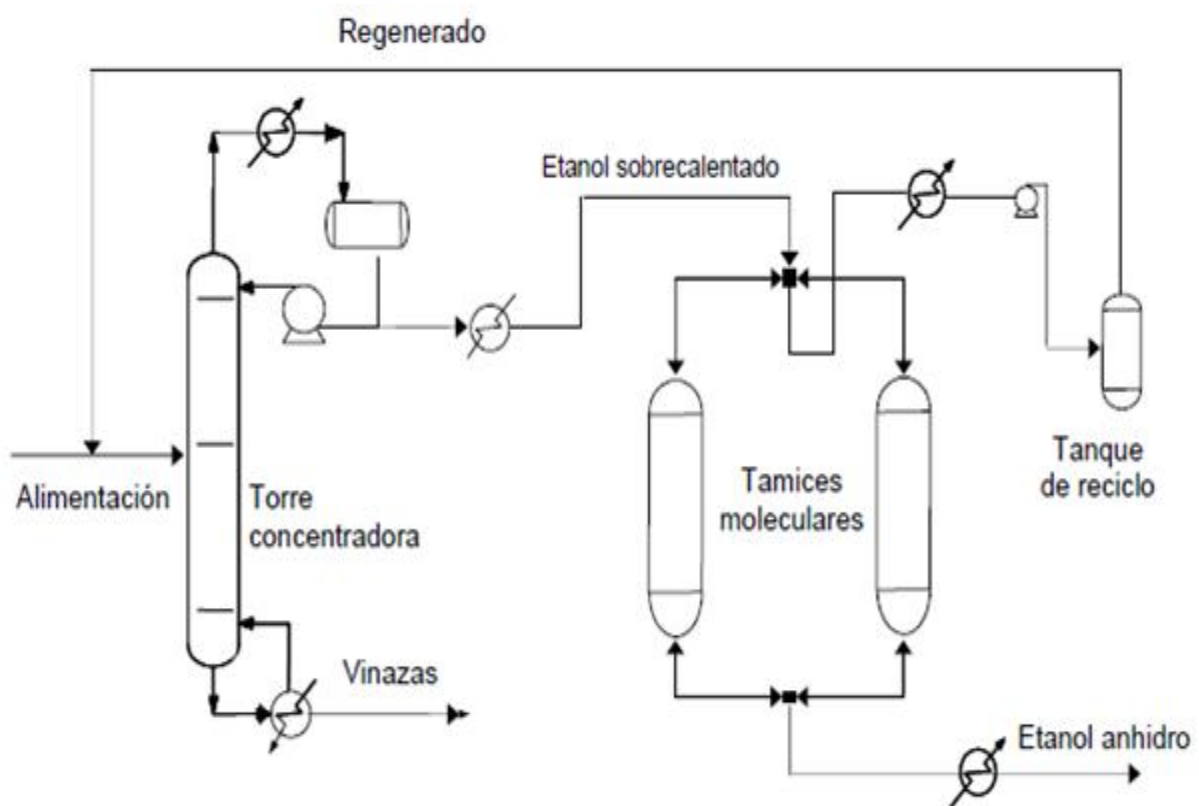


Fig. 1.12 Diagrama esquemático de la deshidratación de bioetanol con tamices moleculares

Fuente.- Deshidratación del etanol. A.M. Uyazán 2004

CAPITULO II SIMULACIÓN DE PROCESOS

2.1. SIMULACIÓN: DEFINICIONES E IMPORTANCIAS

El modelamiento y la simulación de procesos por computadora han llegado a ser herramientas ingenieriles extremadamente exitosas para el diseño y optimización de procesos físicos, químicos, y biológicos. El uso de la simulación se ha extendido rápidamente durante las dos décadas pasadas debido a la disponibilidad de las computadoras de alta velocidad.

En la industria de procesos químicos, hoy en día, se resuelven ordinariamente problemas no lineales, grandes y realísticos por medio de la simulación por computadora. Esto significa que virtualmente todos los cálculos de ingeniería son procesados rápidamente.

La simulación de procesos puede ser definida como una técnica para evaluar en forma rápida un proceso con base en una representación del mismo, mediante modelos matemáticos.

La solución de éstos se lleva a cabo por medio de programas de computadora y permiten tener un mejor conocimiento del comportamiento de dicho proceso. El número de variables que aparecen en la descripción matemática de una planta de proceso química puede ser tan grande como 100 mil, y el número de ecuaciones no lineales que deben resolverse pueden ser del orden de miles, por lo tanto la única forma viable de resolver el problema es por medio de una computadora.

2.2. HABILIDADES NECESARIAS PARA LA SIMULACIÓN DE PROCESOS

El incremento del uso de técnicas de simulación por computadora ha ampliado la utilidad de la aproximación científica a la ingeniería. El desarrollo de competencia

en simulación de procesos requiere que el ingeniero adopte las siguientes habilidades.

- ✓ Entendimiento Claro de los Fundamentos Ingenieriles.- El ingeniero debe estar familiarizado con el sistema físico y sus mecanismos para ser capaz de simular inteligentemente un proceso real y evaluar esa simulación. Los procesos no pueden ser vistos como una caja negra.
- ✓ Habilidades de Modelado.- El ingeniero tiene que ser capaz de desarrollar un conjunto de relaciones matemáticas que describan adecuadamente el comportamiento significativo del proceso.
- ✓ Habilidades Computacionales.- Se deben obtener soluciones rápidas y baratas para la simulación de procesos. El ingeniero debe ser capaz de escoger y usar la herramienta computacional apropiada.

2.3. APLICACIÓN DE LA SIMULACIÓN DE PROCESOS

Debido a que la simulación recae dentro de una aproximación científica a la ingeniería y no en una aproximación empírica, ha servido para simular procesos en áreas interdisciplinarias tales como ingeniería biológica e ingeniería ambiental. Los ingenieros han encontrado que la simulación ha sido capaz de hacer contribuciones significativas a la sociedad a través de simulaciones exitosas de sistemas biológicos y ambientales. Los esfuerzos futuros caerán en el modelamiento de sistemas políticos y sociales.

La variedad de aplicaciones de los simuladores de procesos es muy grande, anteriormente sólo los usaban ingenieros que diseñaban procesos, ahora manejan simuladores los ingenieros ambientales, ingenieros de proceso y hasta ingenieros de planta en su lugar de trabajo; ingenieros con poca o ninguna instrucción de programación pueden modelar procesos complejos.

En principio, la simulación de procesos puede ser útil en todas las etapas del desarrollo de un proyecto industrial. En las diferentes etapas de un proyecto, puede haber necesidad de realizar simulaciones con diferentes niveles de sofisticación. La simulación de procesos puede usarse en las siguientes etapas de desarrollo de un proyecto industrial:

- ✓ **Investigación y Desarrollo.** Una simulación sencilla puede usarse para probar la factibilidad técnica y económica del proyecto.

- ✓ **Etapla Crítica en la Toma de Decisiones.** Se prueban diferentes alternativas de proceso y condiciones de operación y se toman decisiones. Cuando un proceso es económicamente atractivo, se deben probar diferentes alternativas de tamaño y localización de la planta industrial y determinar condiciones de operación óptima.

- ✓ **Planta Piloto.** Simulación con modelos más sofisticados para obtener mejores estimaciones de las condiciones de operación a escala industrial. Las simulaciones son una forma razonable de extrapolar la ejecución y escalamiento de los procesos. Incorporando mecanismos fundamentales en la simulación de procesos, la ejecución de los sistemas puede ser predicha en regiones de operaciones nuevas y diferentes.

- ✓ **Diseño.** La simulación proporciona todos los datos de proceso requeridos para el diseño detallado de los diferentes equipos.

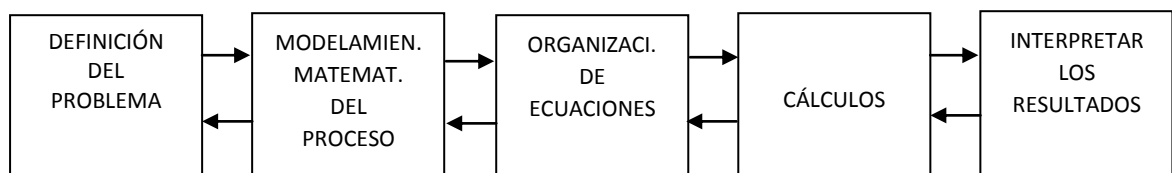
- ✓ **Simulación de Plantas Existentes.** Puede ser muy útil cuando es necesario cambiar las condiciones de operación, o cuando se quiere sustituir materias primas.

- ✓ **Rentabilidad Económica.** Para propósitos de diseño, es usualmente barato usar técnicas de simulación incorporando datos fundamentales del laboratorio en el modelo matemático que puedan servir para construir plantas piloto de diferentes tamaños.
- ✓ **Caracterización del Proceso.** Es una forma conveniente de investigar los efectos de los parámetros del sistema y las perturbaciones del proceso en operación. Usualmente es muy fácil desarrollar aproximaciones alternativas de operación y evaluar esas alternativas con un modelo matemático en lugar de hacerlo por métodos experimentales.

Para verificar los resultados de la simulación usualmente algunos experimentos son realizados, pero solamente los experimentos realmente críticos son necesarios.

2.4. ESTRATEGIA PARA REALIZAR EL ESTUDIO DE SIMULACIÓN

La estrategia general para la simulación de procesos complejos sigue una ruta bien definida que consiste de los pasos de sentido común dados en el diagrama de bloques acompañante. Note que la información viaja en ambas direcciones, indicando la naturaleza adaptativa del desarrollo de alguna simulación exitosa.



2.4.1. DEFINICIÓN DEL PROBLEMA

Esta es una fase muy importante de una simulación exitosa pero desafortunadamente hay muy pocas reglas generales y precisas que se apliquen. La clave real a la definición del problema es un ingeniero imaginativo. Lo que se

requiere es un pensamiento creativo basado en entrenamiento ingenieril. El ingeniero debe gastar suficiente tiempo en este aspecto del problema antes de proceder. Una buena definición del problema viene de responder las siguientes preguntas:

- ✓ ¿Qué quiero encontrar?
- ✓ ¿Cuáles son las consecuencias importantes del estudio?
- ✓ ¿Por qué se hará este trabajo?
- ✓ ¿Qué esfuerzos ingenieriles se requerirán?
- ✓ ¿Cuánto tiempo tomará el trabajo?

2.4.2. FORMACIÓN DEL MODELO MATEMÁTICO DEL PROBLEMA

Después de haber definido el problema, el ingeniero está listo para escribir las ecuaciones de balance y relaciones mecánicas apropiadas para el proceso. Los experimentos críticos de laboratorio (en caso de haberlos) deben ser diseñados y ejecutados para determinar mecanismos desconocidos y parámetros del modelo. Las decisiones deben hacerse sobre los efectos importantes y sobre los que pueden despreciarse. Un análisis de orden de magnitud ayuda a simplificar estas decisiones críticas. Es imperativo que el ingeniero este consciente y no sobrestime ni olvide las suposiciones hechas en el desarrollo del modelo matemático.

El modelamiento matemático de los procesos se obtiene de aplicar las leyes de conservación, además de aplicar relaciones adicionales de todas las áreas afines con la ingeniería de procesos (termodinámica, cinética, etc.). Estas relaciones se expresan como:

- ✓ Ecuaciones de balance global de materia
- ✓ Ecuaciones de balance de materia por componente
- ✓ Ecuación de balance de energía

- ✓ Ecuaciones de balance de energía
- ✓ Ecuaciones de balance de momento
- ✓ Relaciones de equilibrio
- ✓ Otras relaciones.

2.4.3. ORGANIZACIÓN DE LAS ECUACIONES

Una vez que las relaciones matemáticas se han obtenido, tienen que ser arregladas en una estrategia de solución, eso es, se tienen que tomar decisiones sobre cuál variable debe ser resuelta con cuál relación. Para problemas pequeños, comúnmente llevamos este trabajo rutinariamente sin mucho esfuerzo mental. Sin embargo, para problemas grandes se debe tener precaución. Se recomienda arreglar las ecuaciones en una tabla de ocurrencias o en un diagrama de bloques de flujo de información. Estas herramientas son útiles para propósitos de organización e ilustran las interrelaciones entre ecuaciones-variables. También las ecuaciones serán arregladas tal que la estrategia de solución sea paralela a la relación lógica de causa y efecto del sistema físico. Este ordenamiento natural de las ecuaciones usualmente tiende a estrategias de soluciones estables y eficientes.

2.4.4. CÁLCULO

Para obtener soluciones a problemas de simulación de procesos, el ingeniero tiene disponibles varios niveles de cálculos - que van desde soluciones por inspección hasta soluciones analíticas y soluciones por computadora de alta velocidad. Debido a la complejidad y la no-linealidad de problemas de simulación de procesos, la mayoría de soluciones requieren la solución por computadora digital de alta velocidad. Las computadoras digitales son particularmente útiles para resolver problemas que involucran manipulaciones numéricas. Para ello es necesario saber programar y conocer los métodos numéricos de solución matemática de ecuaciones.

Métodos numéricos

Los métodos numéricos para la solución de conjuntos de ecuaciones algebraicas, diferenciales ordinarias, diferenciales parciales y métodos de optimización son necesarios. De esta manera, el esfuerzo debe enfocarse en usar el mejor método de solución disponible para el conjunto de ecuaciones obtenidas en el modelamiento. Dentro de los métodos se tienen:

- ✓ Solución analítica.- Problemas sencillos (problemas lineales)
- ✓ Solución numérica.- Problemas de alta dificultad (problemas no-lineales)
 - Solución de Ecuaciones (bisección, falsa posición, secante, Newton, etc.)
 - Algebra lineal (eliminación Gaussiana, Gauss-Seidel, Jacobi, etc.)
 - Métodos de regresión
 - Integración numérica (trapecio, Simpson, Romberg, cuadratura Gaussiana, etc.)
 - Solución numérica de EDO (Euler, Runge-Kutta, Heun, etc.)
 - Solución numérica de EDP (separación de variables, métodos espectrales, diferencias finitas, etc.)
 - Optimización (simplex, sección dorada, gradiente, Newton, etc.)

2.4.5. INTERPRETACIÓN DE LOS RESULTADOS

El beneficio real de la simulación de procesos recae en la interpretación inteligente de los resultados por parte del ingeniero. En este punto, el ingeniero debe acertar cuando el modelo es una representación válida del proceso actual o cuando éste necesita revisión y actualización. El ingeniero debe asegurarse que los resultados sean razonables. Se deben tomar decisiones sobre el proceso simulado, se obtengan o no los objetivos establecidos en la definición del problema. También, se investigarán alternativas razonables en un esfuerzo para mejorar la ejecución del proceso.

2.5. USO DEL SIMULADOR CHEMCAD V-6.2

CHEMCAD es una herramienta de simulación de procesos muy amigable y rigurosa que junto a sus diferentes módulos integrados logran resolver el 95% de los problemas en la ingeniería química en tiempo récord y con resultados confiables.

Importantes corporaciones a escala global han hecho de CHEMCAD su estándar gracias a su Alta Sofisticación Tecnológica y Excelente servicio de Soporte Técnico. Más de mil (1000) empresas, clientes disfrutan de CHEMCAD y de los software integrados de la familia CHEMCAD.

2.5.1. CARACTERÍSTICAS GENERALES DE CHEMCAD:

- ✓ Diagramas de Flujo y Reportes configurables, en MS Word o Excel.
- ✓ Poderosas capacidades de gráfico: curvas de destilación/absorción, diagramas de fases, diagramas presión-temperatura vs. Concentración, gráficas de predicción propiedades físico-químicas vs. Temperatura de corrientes de proceso y de sustancias puras, curvas de calor, ejes logarítmicos, exportación de datos a Excel.
- ✓ Poderosa herramienta de Optimización de Procesos.
- ✓ Herramienta de Análisis de Sensibilidad que le permite probar escenarios sin la necesidad de modificar la simulación base e identificar situaciones críticas y óptimas.
- ✓ Predicción de hidratos.
- ✓ Reportes de Impacto Ambiental de corrientes de descarga según parámetros de la EPA, Carbono orgánico total, y Demanda Química de Oxígeno (DQO).
- ✓ Interfaces con Excel y AutoCAD (para elaborar sus diagramas de ingeniería), con los módulos CC-THERM, CC-STEADY STATE, CC-DYNAMICS y CC-BATCH.

- ✓ Conexión con Visual Basic/ Excel que le permite programar sus propias operaciones unitarias dentro del diagrama de proceso, utilizando funciones termodinámicas y la base de datos de sustancias puras de CHEMCAD desde la programación en Excel.
- ✓ Convergencia de operaciones unitarias independientes del diagrama de proceso. Esta característica es excelente para un manejo más rápido y flexible de la convergencia de simulaciones grandes y complejas.

CAPÍTULO III

MODELOS QUE DESCRIBEN LA COLUMNA DE DESTILACIÓN

3.1 MODELADO DE LA COLUMNA

La distinción principal de los presentes días, es que los procesos químicos proceden a grandes velocidades en sistemas de multifase, además son de extrema complejidad. Esta complejidad se debe a la multiplicidad y diversidad de variables de proceso y las ramificaciones de las relaciones internas entre ellas, debido a las cuales un cambio en una variable puede ocasionar cambios no lineales en otras variables. Esta complejidad aumenta en los casos de múltiples reciclos y reacciones competitivas, los cuales pueden cambiar totalmente el modelo. Además de esto, puede sobreponerse al proceso cualquier perturbación.

3.2 MODELAMIENTO FÍSICO.

En este caso el proceso de interés es reproducido en diferentes escalas y se analiza el efecto de las características físicas. El experimento es llevado a cabo directamente sobre el proceso real. Los datos experimentales son reducidos a relaciones incluyendo grupos dimensionales hechos sobre varias combinaciones de cantidades físicas y dimensiones lineales. Con esta presentación dimensional, las relaciones encontradas pueden ser generalizadas a clases de eventos teniendo los mismos grupos dimensionales o similar criterio. Estos grupos dimensionales son derivados sobre la base de ecuaciones diferenciales o análisis dimensional. (ROBERT E.TREYBAL, 1998, 2 edición.)

El modelamiento físico consiste en buscar la misma o casi la misma similitud de criterio para el modelo y el proceso real. Como ya se ha notado antes, los procesos reales son modelados en una escala de crecimiento progresivo, con la

dimensión longitudinal principal hecha en proporción (criterio de similitud). (ROBERT E.TREYBAI, 1998, 2 edición.)

3.3. MODELAMIENTO MATEMÁTICO

El modelamiento matemático es el proceso de creación de una representación matemática de algún fenómeno en razón de conseguir un mejor entendimiento del fenómeno. Es un proceso en el cual se cambia la observación con el establecimiento simbólico. Durante la construcción de un modelo, el modelista deberá decidir que factores serán relevantes para el fenómeno y cuales podrán dejar de enfatizarse.

En la construcción de un modelo matemático, un proceso real es reducido a sus bases esenciales, y el esquema resultante es descrito por un formulismo matemático seleccionado de acuerdo a la complejidad del proceso.

Es importante que un modelo deberá representar con suficiente exactitud las propiedades cuantitativas y cualitativas del fenómeno; en otras palabras, el modelo deberá adaptarse adecuadamente al proceso real. Para verificar esta necesidad, las observaciones hechas sobre el fenómeno deberán compararse con las predicciones derivadas del modelo bajo idénticas condiciones. Entonces un modelo matemático de un fenómeno (proceso) químico real es una descripción matemática combinando las observaciones experimentales y estableciendo relaciones entre las variables de proceso.

El objetivo final de un modelo matemático es la predicción del comportamiento del proceso y recomendar los debidos sistemas de control.

3.4. MODELAMIENTO MATEMÁTICO GENERALIZADO DE UNA COLUMNA DE DESTILACIÓN

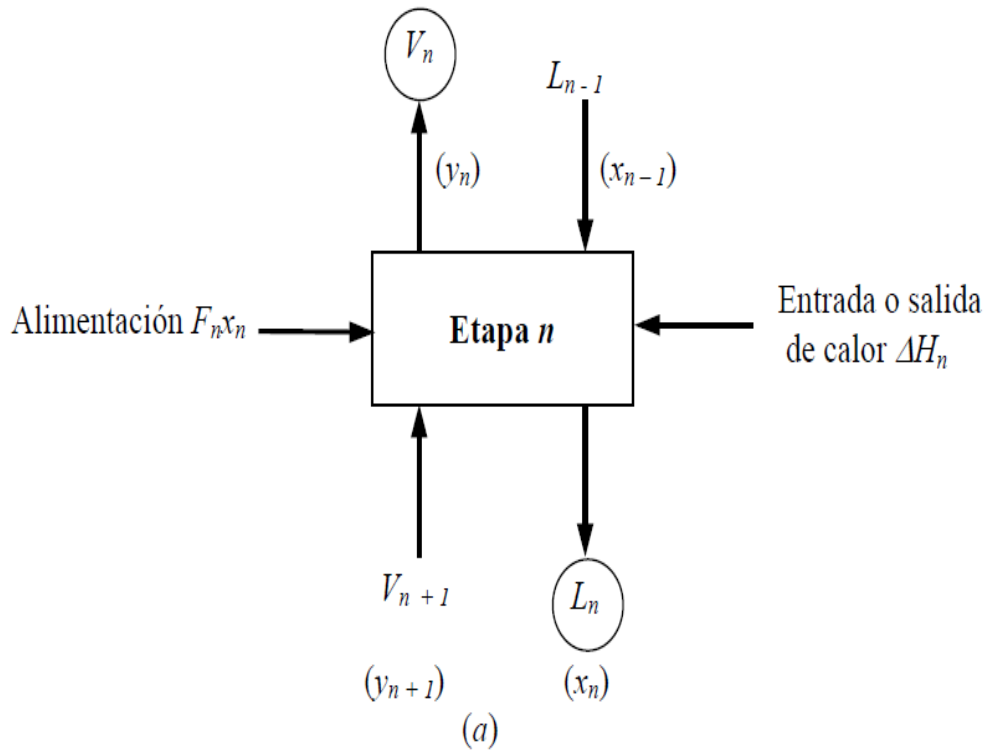
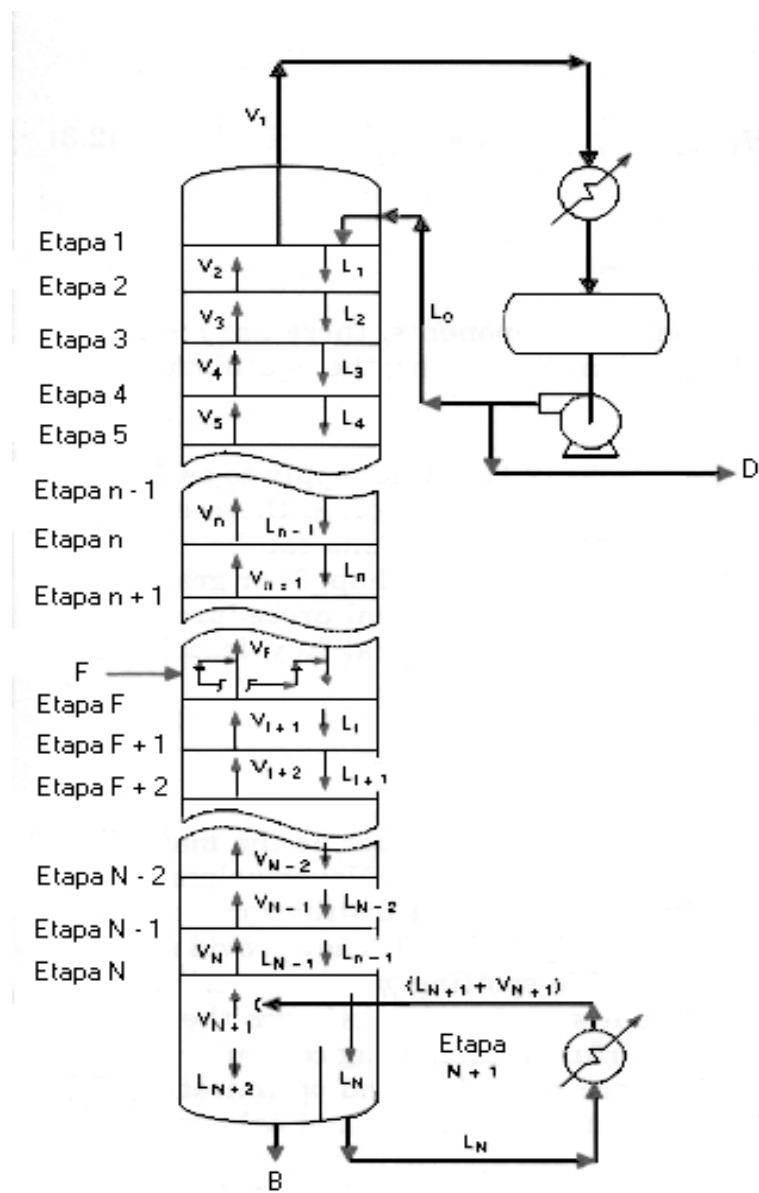


Fig. 3.1a Modelo de etapa de fraccionamiento. (a) Una etapa; (b) fraccionador
Fuente: Operaciones Unitarias en Ingeniería Química-McCaB, W.; Smith, J, Harriot, P.1998



Etapas múltiples (Fig. 3.1b). Las Ecuaciones. (3.1) a (3.4) se aplican a cada etapa. Una solución rigurosa (Cap. 5) resuelve simultáneamente estas ecuaciones para cada etapa y cada componente. Las ecuaciones pueden simplificarse y resolverse por procedimientos analíticos cortos.

Fuente: Operaciones Unitarias en Ingeniería Química-McCaB, W.; Smith, J; Harriot, P.1998

3.4.1. BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA

Para una etapa de destilación simple binaria (Fig. 3.1 a) se aplican las siguientes ecuaciones:

Balance total de materia

$$F_n + V_{n+1} + L_{n-1} = V_n + L_n \quad (3.1)$$

Balance por componente

$$F_n Z_n + V_{n+1} Y_{n+1} + L_{n-1} X_{n-1} = V_n Y_n + L_n x_n \quad (3.2)$$

Balance de energía

$$\Delta H_n + F_n H_{f,n} + V_{n+1} H_{v,n+1} + L_{n-1} H_{L,n-1} = V_n H_{v,n} + L_n H_{L,n} \quad (3.3)$$

Relación de equilibrio

$$y_n = K x_n \quad (3.4)$$

En destilación de múltiple componentes de j componentes, hay $j - 1$ balances de componentes y $j - 1$ ecuaciones que describen las relaciones de equilibrio.

3.5. MODELOS DE COLUMNA Y ETAPAS

Modelo de columna. Un método riguroso describe una columna como un grupo de ecuaciones y resolver estas ecuaciones para calcular condiciones de operación de la columna. Todos los flujos son expresados usualmente en términos de moles/hora. También cuando es ejecutado un cálculo riguroso, usualmente se especifica lo siguiente.

- ✓ Velocidad, composición, y condición de cada alimentación
- ✓ Número de etapas en la columna
- ✓ La etapa para cada alimentación, producto, intercambio de calor, y bombeo
- ✓ Especificaciones de la separación
- ✓ Perfil de presión en la columna.

- ✓ Los cálculos de diseño y operación de la columna se presentan al estado estacionario.

Por ejemplo, que entra a la columna y que sale

Σ (flujos molares de alimentación) = Σ (flujos molares de producto)

Σ (de moles de los componentes en la alimentación) = Σ (de moles de los componentes en los productos)

Entalpía de la alimentación de alimentación + calor adicionado = entalpías de los productos + calor removido

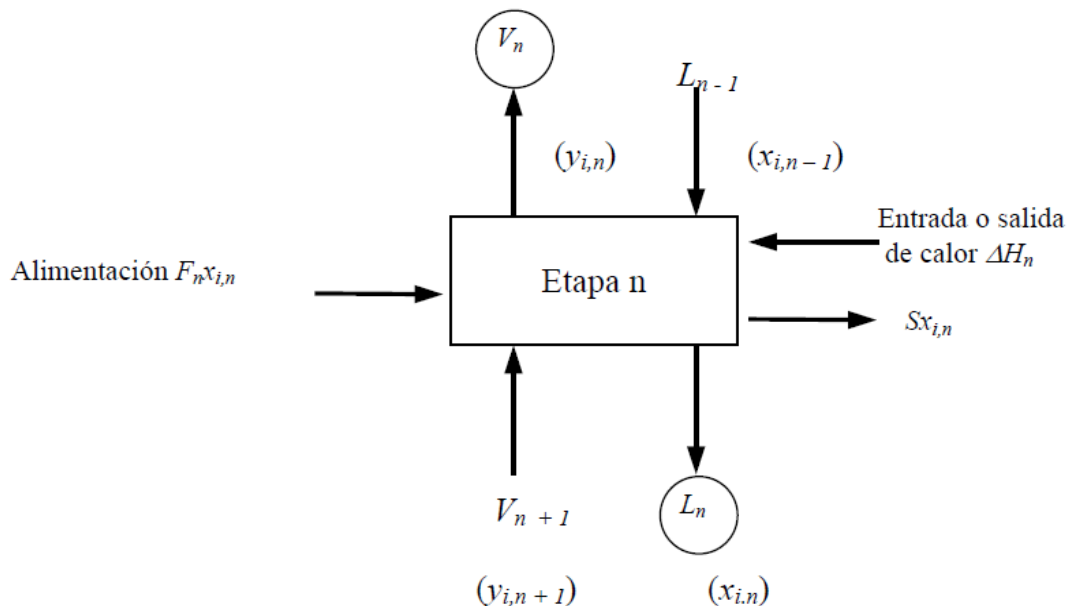


Fig. 3.2. Modelo de etapa de fraccionamiento para diseño riguroso

Fuente: Operaciones Unitarias en Ingeniería Química-McCaB, W.; Smith, J; Harriot, P.1998

La estructura general para un problema de destilación en el cálculo etapa por etapa comprende

- 1.- Relación de equilibrio

$$y_{i,n} = K_{i,n} x_{i,n} \quad (3.5)$$

- 2.- Balance de materiales en torno a la etapa n

- 2.1.- Balance total de materia

$$F_n + V_{n+1} + L_{n-1} = V_n + L_n - S_n \quad (3.6)$$

2.2.- Balance por componente

$$F_n z_{i,n} + V_{n+1} y_{i,n+1} + L_{n-1} x_{i,n-1} = V_n y_{i,n} + L_n x_{i,n} + S_n x_{i,n} \quad (3.7)$$

3.- Balance de energía

$$\Delta H_n + F_n H_{f,n} + V_{n+1} H_{v,n+1} + L_{n-1} H_{L,n-1} = V_n H_{v,n} + L_n H_{L,n} \quad (3.8)$$

4.- Restricciones inherentes a las fracciones molares

$$\sum x_{i,n} = 1 \quad (3.9)$$

$$\sum y_{i,n} = 1 \quad (3.10)$$

Los pasos básicos para un procedimiento rigurosos de solución serán

- ✓ Especificación del problema; una especificación completa es esencial para los métodos por computador.
- ✓ Selección de valores para las variables de iteración; por ejemplo, temperatura estimada de las etapas, y flujos de líquido y vapor (perfiles de temperatura de la columna y flujos).
- ✓ Un procedimiento de cálculo para la solución de las ecuaciones de etapas.
- ✓ Un procedimiento para la selección de nuevos valores para las variables de iteración para conjunto de cálculos supuestos.
- ✓ Un procedimiento para verificar la convergencia; para verificar si se ha conseguido una solución satisfactoria.

3.6. MÉTODOS CORTOS DE DISEÑO Y OPTIMIZACIÓN DE COLUMNAS

El proceso de diseño de una columna específica de separación y ajusta la presión de la columna, reflujo, etapas, y punto de alimentación. Esto en su turno produce los flujos internos y las cargas del re hervidor y condensador. Este capítulo se orientará a las principales consideraciones del proceso de diseño de columnas. La columna se optimiza durante el proceso de diseño, y muchas veces después, durante la operación.

El proceso de diseño de columnas se efectúa por etapas. Los métodos cortos proporcionan un punto de partida para los cálculos rigurosos. Los cálculos rigurosos refinan el diseño y completan la optimización de la columna. (Perry, 2001).

3.7. MÉTODOS DE DISEÑO PARA SISTEMAS BINARIOS

Un buen entendimiento de las ecuaciones desarrolladas para sistemas binarios es esencial para el entendimiento de procesos de destilación.

Aun cuando los sistemas binarios son usualmente considerados separadamente, los métodos de diseño desarrollados para sistemas de múltiple componentes pueden obviamente también usarse para sistemas binarios. Con mezclas binarias fijando la composición de un componente se fija la composición del otro, y no son usualmente necesarios procesos iterativos para determinar los requerimientos de etapas y reflujo: normalmente se usan métodos gráficos simples. (Perry, 2001)

3.8. DISTRIBUCIÓN DE COMPONENTES (BALANCE DE MATERIALES)

El balance de materiales en una columna de multicomponentes es simple y se puede hacer sobre la base del balance total y un balance parcial con lo cual se tiene:

Balance total (molar)

$$F = D + B \quad (3.11)$$

Siendo:

F: Flujo de alimentación al sistema

D: Producto obtenido en el tope de la columna

B: Residuo obtenido en la columna, circula por la parte inferior

Balance parcial (molar)

$$Fx_{fi} = Dx_{di} + Bx_{bi} \quad (3.12)$$

Al hacer el diseño de la columna generalmente se tiene como dato **F** y x_{fi} , y la separación se hace para obtener un producto ya sea en el tope o el fondo con una composición especificada ya sea x_{di} o x_{bi} . Para un sistema binario conociendo la fracción molar de un componente automáticamente se conoce del otro componente de ya que la suma de las dos fracciones debe dar la unidad. (Perry, 2001).

Con estas consideraciones el balance de materiales en un sistema binario es simple.

3.9. NÚMERO DE ETAPAS DE EQUILIBRIO

3.9.1. MÉTODO DE MCCABE-THIELE

Este método puede ser usado para el diseño de columnas con alimentaciones múltiples. Los flujos de vapor y líquido en la sección entre la alimentación y los puntos de salida son calculados y las líneas de balance de materiales dibujadas en cada sección.

El método de McCabe –Thiele no se puede usar cuando no se puede asumir la condición de flujo equimolar. Las líneas de balance de materiales no son rectas en este caso y no pueden dibujarse. Alternativamente se puede usar el método

riguroso de Ponchon Savarit. Pero en los presentes días raramente se puede optar por un método gráfico riguroso ya que cuando el método de McCabe-Thiele no es suficientemente adecuado se puede usar un programa por computador. (Robert E. Treybal, 1968, 2 edición)

3.9.2. LA ECUACIÓN DE SMOKER

(Smoker, 1938) derivó una ecuación analítica que puede ser usada para determinar el número de etapas cuando la volatilidad relativa es constante. Aunque este método puede ser usado para cualquier problema para el cual las volatilidades relativas en las secciones de rectificación y agotamiento se puedan tomar como constantes, esto es particularmente provechoso para problemas donde la volatilidad relativa es baja, por ejemplo, en la separación de isómeros de puntos de ebullición cercanos. Si la volatilidad relativa es cercana a la unidad, el número de etapas debe ser muy grande y es impracticable dibujar un diagrama de McCabe –Thiele.

La derivación de la ecuación es bosquejada a continuación

Derivación de las ecuaciones

Una línea recta de balance de materiales puede expresarse por la ecuación

$$y = sx + c \tag{3.13}$$

Y en términos de la volatilidad relativa, los valores de equilibrio de y están dados por:

$$y = \frac{\alpha x}{1 + (\alpha - 1)x} \tag{3.14}$$

Eliminando y de estas ecuaciones da una ecuación cuadrática en x :

$$s(\alpha - 1)x^2 + [s + b(\alpha - 1) - \alpha]x + b = 0 \quad (3.15)$$

Para cualquier problema particular de destilación la Ec. 3.15 tendrá solamente una raíz real k entre 0 y 1

$$s(\alpha - 1)k^2 + [s + b(\alpha - 1) - \alpha]k + b = 0 \quad (3.16)$$

K es el valor de la ordenada x en el punto donde las líneas de balance de materiales extendidas cortan a la curva de equilibrio. Smoker demostró que el número de etapas requerido es dado por la ecuación

$$N = \log \left[\frac{x_0^*(1 - \beta x_n^*)}{x_n^*(1 - \beta x_0^*)} \right] / \log \left(\frac{\alpha}{SC^2} \right) \quad (3.17)$$

Dónde:

$$\beta = \frac{SC(\alpha - 1)}{\alpha - SC^2} \quad (3.18)$$

N = número de etapas requerido para efectuar la separación representada por el cambio de concentración de

$$x_n^* \text{ a } x_0^*; \quad x^* = (x - k) \text{ y } x_0^* > x_n^*$$

S = pendiente de la línea de balance de materiales entre x_n^* y x_0^*

α = volatilidad relativa, asumida constante sobre x_n^* a x_0^*

- **Sección de Rectificación**

$$x_0^* = x_D - k \quad (3.19)$$

$$x_n^* = z_F - k \quad (3.20)$$

$$S = \frac{R}{R + 1} \quad (3.21)$$

$$B = \frac{x_D}{R + 1} \quad (3.22)$$

- **Sección de Agotamiento**

$$x_0^* = z_F - k \quad (3.23)$$

$$x_n^* = x_B - k \quad (3.24)$$

$$S = \frac{Rz_F + x_D - (R + 1)x_B}{(R + 1)(z_F - x_B)} \quad (3.25)$$

$$b = \frac{(z_F - x_D)x_B}{(R + 1)(z_F - x_B)} \quad (3.26)$$

Si la corriente de alimentación no está a su punto de burbujeo, z_F es reemplazado por el valor de x en la intersección de las líneas de balance de materiales, dado por:

$$z_F^* = \frac{b + z_F/(q - 1)}{\frac{q}{q - 1} - S} \quad (3.27)$$

3.10. DESTILACIÓN DE MULTICOMPONENTES: CONSIDERACIONES GENERALES

El problema del balance de materiales, la determinación del número de etapas y los requerimientos de reflujo para destilación de múltiple componentes es mucho más complejo que para mezclas de sistemas binarios. Con una mezcla de múltiple componentes, fijando la composición de un componente no se determina automáticamente la composición de otro componente y la temperatura de la etapa. También cuando la alimentación contiene más que dos componentes no es posible especificar la composición completa de los productos de tope y del fondo independientemente. La separación entre los productos de tope y del fondo se especifica estableciendo límites sobre las composiciones de los dos componentes claves entre los cuales se desea hacer la separación.

Algunos de los métodos cortos más usados, los cuales pueden usarse para estimar los requerimientos de etapas y reflujo sin la ayuda de computadoras, son dados en esta sección. La mayoría de métodos cortos fueron desarrollados para el diseño de columnas de separación para sistemas de hidrocarburos en la industria del petróleo y petroquímica, y deben tomarse precauciones cuando se extienden a otros sistemas. Estos usualmente se basan en la suposición de volatilidad relativa constante, y podrían no ser usados para sistemas severamente no ideales.

3.10.1. MÉTODO DE HENGSTEBECK

Para cualquier componente i , tomando como base el modelo de etapa de equilibrio dado en la (Fig. 3.1), la composición de balance de materiales y las relaciones de equilibrio pueden escribirse en términos de los flujos molares de los componentes individuales en lugar de la composición del componente:

$$l_{n+1,i} = l_{n+1,i} + d_i \quad (3.28)$$

$$v_{n,i} = K_{n,i} \frac{V}{L} l_{n,i} \quad (3.29)$$

Para la sección de agotamiento

$$l'_{n+1,i} = v'_{n,i} + b_i \quad (3.30)$$

$$v'_{n,i} = K_{n,i} \frac{V'}{L'} l'_{n,i} \quad (3.31)$$

Dónde:

$l_{n,i}$ = flujo molar líquido de cualquier componente i desde la etapa n ,

$v_{n,i}$ = flujo molar vapor de cualquier componente i desde la etapa n ,

d_i = flujo molar de cualquier componente i en el destilado,

b_i = flujo molar de cualquier componente i en los fondos,

$K_{n,i}$ = valor- K para el componente i en la etapa n .

V y L son los flujos molares totales, asumidos constantes.

Para reducir el sistema de múltiple componentes a un sistema binario equivalente es necesario estimar los flujos de los componentes claves a través de la columna. Hengstebeck hizo uso del hecho que en una destilación típica el flujo de cada uno de los componentes ligeros no claves se aproximan a ser constantes en la sección de rectificación; y los flujos de cada uno de los componentes pesados no claves se aproximan a ser constantes en la sección de agotamiento. Colocando los flujos de los componentes no claves iguales al flujo límite de cada uno en cada sección, permite estimar los flujos combinados de los componentes claves.

- **Sección de rectificación**

$$L_s = L + \sum l_i \quad (3.32)$$

$$V_s = V + \sum v_i \quad (3.33)$$

- **Sección de agotamiento**

$$L'_e = L + \sum l'_i \quad (3.34)$$

$$V'_e = V + \sum v'_i \quad (3.35)$$

Dónde:

V_e y L_e son los flujos combinados, estimados de los claves l_i y v_i son los flujos limitantes en el líquido y en el vapor de los componentes más ligeros que los claves en la sección de rectificación, l'_i y v'_i son los flujos limitantes en el líquido y en el vapor de los componentes más pesados que los claves en la sección de agotamiento.

El método usado para estimar los flujos límites es dado por las ecuaciones:

$$l_i = \frac{d_i}{\alpha_i - 1} \quad (3.36)$$

$$v_i = l_i + d_i \quad (3.37)$$

$$v'_i = \frac{\alpha_i b_i}{\alpha_{LK} - \alpha_i} \quad (3.38)$$

$$l'_i = v'_i + b_i \quad (3.39)$$

Dónde:

α_i = volatilidad relativa del componente i , con relación al clave pesado (HK)

α_{LK} = volatilidad relativa del clave ligero (LK) con relación al clave pesado.

La estimación de los flujos de los componentes claves combinados. Posibilitan dibujar las líneas de balance de materiales para el sistema binario equivalente. La línea de equilibrio se dibuja asumiendo volatilidad relativa para el clave ligero constante.

3.10.2. MÉTODO DE CONVERGENCIA

(Holland, 1981) propuso un método riguroso para diseño de columnas de destilación. Una de las aplicaciones de este método es para determinar la distribución correcta de los componentes no claves.

La distribución correcta se determina:

- ✓ Definiendo una cantidad Θ donde

$$d'_i = \frac{F_{zi}}{1 + \left(\frac{b_i}{d_i}\right)\Theta} \quad (3.40)$$

Donde los valores de d' i son tales que satisfacen $\sum d' i = D$ especificado

- ✓ Del balance de materiales

$$b_i + d_i = z_i \quad (3.41)$$

$$d_i = \frac{f_i}{1 + \left(\frac{b_i}{d_i}\right)} \quad (3.42)$$

Comparando las Ecs. (3.41) y (3.42) se muestra que

$$b'_i = \Theta \left(\frac{b_i}{d_i}\right) d'_i \quad (3.43)$$

- ✓ Debería encontrarse un valor de Θ mediante la solución de la siguiente ecuación no lineal, donde D es la cantidad especificada de destilado.

$$D - \sum \frac{f_i}{1 + (b_i/d_i)^\Theta} = 0 \quad (3.44)$$

- ✓ Los valores de (b_i/d_i) y Θ son usados en la Ecs. (4.40) y (4.42) para evaluar las cantidades finales correctas de los componentes: d'_i y b'_i .

3.10.3. NÚMERO MÍNIMO DE ETAPAS

(Fenske, 1932) La ecuación de Fenske, puede usarse para estimar el número mínimo de etapas requeridas a reflujo total. Esta ecuación aplicada a un sistema de múltiple componentes se puede escribir como:

$$\left[\frac{x_i}{x_r} \right]_D = \alpha_{i/r}^{N_m} \left[\frac{x_i}{x_r} \right]_B \quad (3.45)$$

Dónde:

$\left[\frac{x_i}{x_r} \right]$ = relación de concentraciones de cualquier componente i a la concentración de un componente de referencia r , y los sufijos D y B denotan el destilado (tope) (D) y el fondo (B).

N_m = número mínimo de etapas a reflujo total, incluyendo el re hervidor.

$\alpha_{i/r}$ = volatilidad relativa promedio del componente i con respecto al componente de referencia.

Normalmente la separación requerida se especifica en términos de los componentes claves, y la Ec. 3.45 puede ser re arreglada para dar un estimado del número de etapas.

$$N_m = \ln S / \ln(\alpha_{LK/HK})_{av} \quad (3.46)$$

Donde S está dada por:

$$S = \left(\frac{x_{LK}}{x_{HK}} \right)_D \left(\frac{x_{HK}}{x_{LK}} \right)_B \quad (3.47)$$

Donde $\alpha_{(LK/HK)av}$ es la volatilidad relativa promedio del clave ligero con respecto al clave pesado, y x_{LK} , x_{HK} son las concentraciones de los claves ligero y pesado. La volatilidad relativa se toma como la media geométrica de los valores a las temperaturas de tope y el fondo de la columna. Para calcular estas temperaturas se deben hacer estimados iniciales de las composiciones, así el cálculo del número mínimo de etapas por la ecuación de Fenske es un procedimiento de prueba y error. Si hay una gran diferencia entre las volatilidades relativas del tope y del fondo de la columna, el uso del valor promedio en la ecuación de Fenske se estimará un número de etapas menor al requerido. En este caso un mejor estimado puede hacerse calculando el número de etapas en la sección de rectificación y agotamiento separadamente, tomando la concentración de la alimentación como la concentración base para la sección de rectificación y como la concentración del tope para la sección de agotamiento, y estimando la volatilidad relativa promedio separadamente para cada sección. Este procedimiento también dará un estimado de la ubicación del punto de alimentación.

3.10.4. REFLUJO MÍNIMO

Método de Underwood. Underwood, derivó ecuaciones para estimar la relación de reflujo mínimo para destilación de múltiple componentes. Este método resuelve una ecuación la cual relaciona la composición de la alimentación, la condición térmica de la alimentación, y la volatilidad relativa a la temperatura promedio de la columna para un factor θ este factor es sustituido en una segunda ecuación la cual relaciona el reflujo mínimo a la volatilidad relativa y la composición del destilado. El método asume volatilidad relativa constante a la temperatura

promedio de la columna y flujos molares constantes. Este método da aproximaciones de ingeniería razonables para sistemas que se aproximan a la idealidad. El método de Underwood ha sido tradicionalmente el más popular para determinación del reflujo mínimo. El método es:

1. Encontrar θ (el cual debe estar entre los valores de las volatilidades relativas de los componentes claves) por un método de prueba y error usando la ecuación:

$$\sum \frac{\alpha_i x_{i,F}}{\alpha_i - \theta} = 1 - q \quad (3.48)$$

Dónde:

α_i = volatilidad relativa del componente i con respecto a algún componente de referencia, usualmente el clave pesado

$x_{i,F}$ = concentración del componente i en la alimentación y q depende de la condición de la alimentación

2. Reemplazar θ en la siguiente ecuación para calcular $(L/D)_m = R_m$

$$R_m + 1 = \sum \frac{\alpha_i x_{i,D}}{\alpha_i - \theta} \quad (3.49)$$

Dónde:

R_m = relación mínima de reflujo

$x_{i,D}$ = concentración del componente i en el tope a reflujo mínimo

En la derivación de las ecuaciones (3.48) y (3.49) las volatilidades relativas son tomadas como constantes. Podría usarse el promedio geométrico de los valores estimados de las temperaturas del tope y del fondo. Esto requiere un estimado de las composiciones del tope y del fondo. Aun cuando las composiciones deberían ser estrictamente las dadas para reflujo mínimo, se pueden usar los valores determinados a reflujo total, de la ecuación de Fenske.

3.10.5. RELACIONES ENTRE ETAPAS Y REFLUJO

Las relaciones más populares entre reflujo y etapas son las de Gilliland y Erbar y Maddox. Muchos diseñistas recomiendan ambas, algunos prefieren Gilliland, mientras que otros prefieren Erbar y Maddox. La correlación de Erbar y Maddox es considerada más exacta, especialmente a bajas relaciones de reflujo, sin embargo, la exactitud de la correlación de Gilliland para métodos cortos de cálculo es usualmente satisfactoria. Las dos correlaciones son consistentes con la ecuación de Fenske y el método de Underwood.

Correlación de Gilliland (Fig. 3.3). Esta gráfica correlaciona el reflujo y las etapas por

$$X = \frac{R - R_m}{R + 1} \quad (3.50)$$

$$Y = \frac{N - N_m}{N + 1} \quad (3.51)$$

Cuando $R = R_m$, $X = 0$, y Y se aproxima a la unidad. Cuando $N = N_m$, $Y = 0$, y X se aproxima a la unidad. La curva entonces se extiende desde la coordenada (0,1) a reflujo mínimo hasta (1,0) a reflujo total.

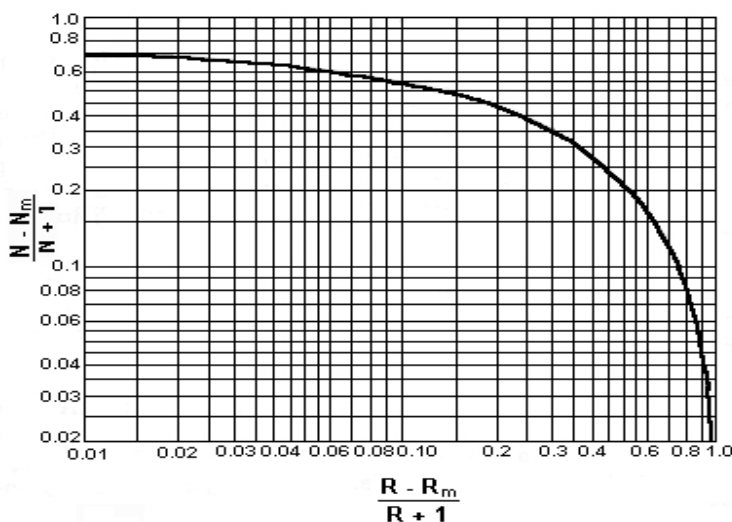


Fig. 3.3 Correlación de Gilliland

Fuente.- Operaciones de transferencia de masa-Robert E. Treybal.1998)

Gilliland usó el método de Fenske para determinar las etapas mínimas y su método para computar el reflujo mínimo. Sin embargo, se ha demostrado que el método de Underwood para reflujo mínimo también puede ser usado.

Ecuaciones numéricas de Gilliland. Desde que Gilliland derivó su correlación original, varios autores han desarrollado ecuaciones numéricas para representarla. Sin embargo la que más se aproxima es la Ecuación de McCormick, dada por las relaciones:

$$Y = 1 - X^B \quad (3.52)$$

$$B = 0.105 \log X + 0.44 \quad (3.53)$$

$$X = \frac{R - R_m}{R + 1} \quad (3.54)$$

$$Y = \frac{N - N_m}{N + 1} \quad (3.55)$$

Correlación de Erbar – Maddox (Fig. 3.4). Este método usa una gráfica de $R/(R + 1)$ contra N_m/N , con $R_m/(R_m + 1)$ como el parámetro. Cuando $R = R_m$ el eje x se hace cero. Por consiguiente, el eje y del diagrama representa las condiciones de reflujo mínimo. Cuando $N = N_m$, ambas coordenadas “x” e “y” se vuelven la unidad.

La Fig. 3.4, está basada en una alimentación a su punto de burbuja. Para otros tipos de alimentación se usa la siguiente correlación:

$$V_u = V_k + \frac{(1 - D/F)(H_{F,u} - H_{F,k})}{Q_c/L_0}$$

En la correlación de Erbar – Maddox, el número mínimo de etapas se calcula por el método de Winn y el reflujo mínimo por el método de Underwood, pero también puede usarse el método de Fenske para las etapas mínimas.

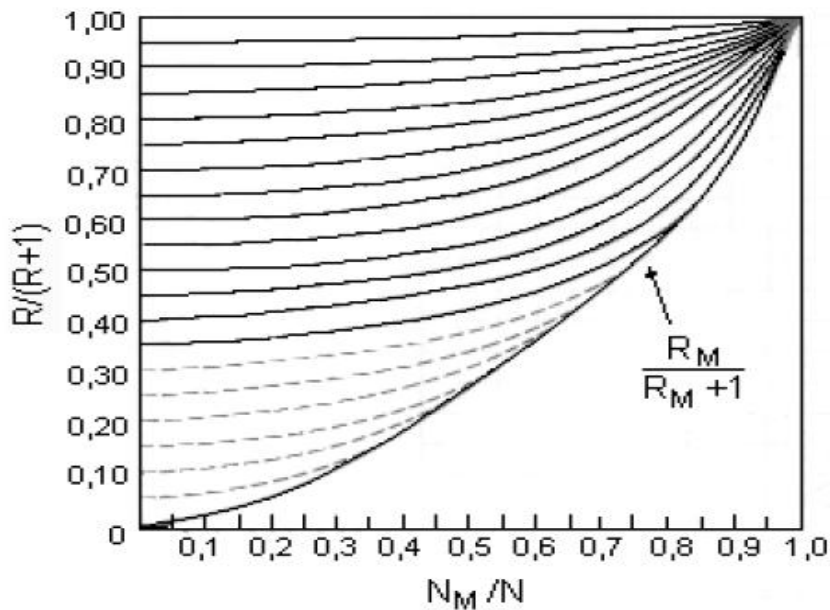


Fig. 3.4. Correlación de Erbar – Maddox

Fuente.- Operaciones de transferencia de masa-Robert E. Treybal.1998)

3.10.6. UBICACIÓN DE LA ETAPA DE ALIMENTACIÓN

Una limitación del método de Erbar – Maddox y similares métodos empíricos, es que ellos no dan la ubicación del punto de alimentación.

Ecuación de Fenske

Un estimado puede hacerse usando la ecuación de Fenske para calcular el número de etapas en las secciones de rectificación y agotamiento separadamente, pero esto requiere un estimado de la temperatura del punto de alimentación.

$$N_{m,S} = \ln S_s / \ln \alpha_s \quad (3.56)$$

Dónde:

$$S_s = \frac{z_{LK} x_{B,HK}}{z_{HK} x_{B,LK}} \quad (3.57)$$

donde α_s es la volatilidad relativa promedio del clave ligero en la sección del fondo. El número de platos actuales en la sección del fondo es estimado de

$$\frac{N_s}{N_{m,s}} = \frac{N}{N_m} \quad (3.58)$$

Ecuación de Kirkbride

Una aproximación alternativa es usar la ecuación empírica dada por Kirkbride

$$\frac{N_R}{N_S} = \left(\left(\frac{B}{D} \right) \left(\frac{z_{HK}}{z_{LK}} \right) \left(\frac{x_{B,LK}}{x_{D,HK}} \right)^2 \right)^{0.206} \quad (3.59)$$

Dónde:

N_R = número de etapas sobre el punto de alimentación, incluyendo cualquier condensador parcial.

N_S = número de etapas por debajo de la alimentación. Incluyendo al re hervidor.

B = flujo molar de los productos del fondo.

D = flujo molar de los productos del tope.

z_{HK} = concentración del clave pesado en la alimentación.

z_{LK} = concentración del clave ligero en la alimentación.

$x_{D,HK}$ = concentración del clave pesado en los productos del tope

$x_{B,LK}$ = concentración del clave ligero en los productos del fondo.

CAPÍTULO IV

DESTILACIÓN EXTRACTIVA

4.1. INTRODUCCIÓN

En este tipo de destilación se agrega una tercera sustancia denominada agente extractivo o disolvente, la cual modifica la volatilidad relativa de los componentes de la mezcla etanol-agua sin formar nuevos azeótropos, permitiendo de esta forma la separación. El disolvente agregado debe ser de baja volatilidad para que su separación en la segunda torre de destilación sea mucho más fácil, así como tener un punto de ebullición alto. No obstante se ha sugerido que la alta viscosidad relativa de los disolventes empleados en la destilación extractiva podría disminuir la eficiencia de la transferencia de masas. En este tipo de destilación, se utilizan varios tipos de sustancias, como son: etilenglicol, glicerol; pero los costos energéticos son mayores comparados con la destilación azeotrópica con benceno; la desventaja que ofrece el benceno en la destilación azeotrópica heterogénea, es la formación de dos fases (fase orgánica y fase acuosa), incrementando la inversión, ^{al} tener que utilizar una tercera columna, donde nuevamente existe la formación del azeótropo binario (agua-etanol); además el benceno es un compuesto cancerígeno; a pesar de todo, la destilación azeotrópica extractiva, es competitiva energéticamente.

El criterio de selección del solvente a utilizar en la destilación extractiva, es que no introduzcan ningún azeótropo adicional, en cuyo caso el agente extractor se recupera en un equipo de destilación adicional.

4.2. PASOS A SEGUIR EN LA DESTILACIÓN EXTRACTIVA

Para la deshidratación de bioetanol, el Glicerol es una sustancia ideal para la destilación extractiva, ya que es miscible en agua a todas las concentraciones, posee mayor punto de ebullición que el agua, no forma azeótropo con ella o con

solventes orgánicos y tiene una afinidad molecular por el agua permitiéndola exhibir una desviación negativa para un comportamiento ideal.

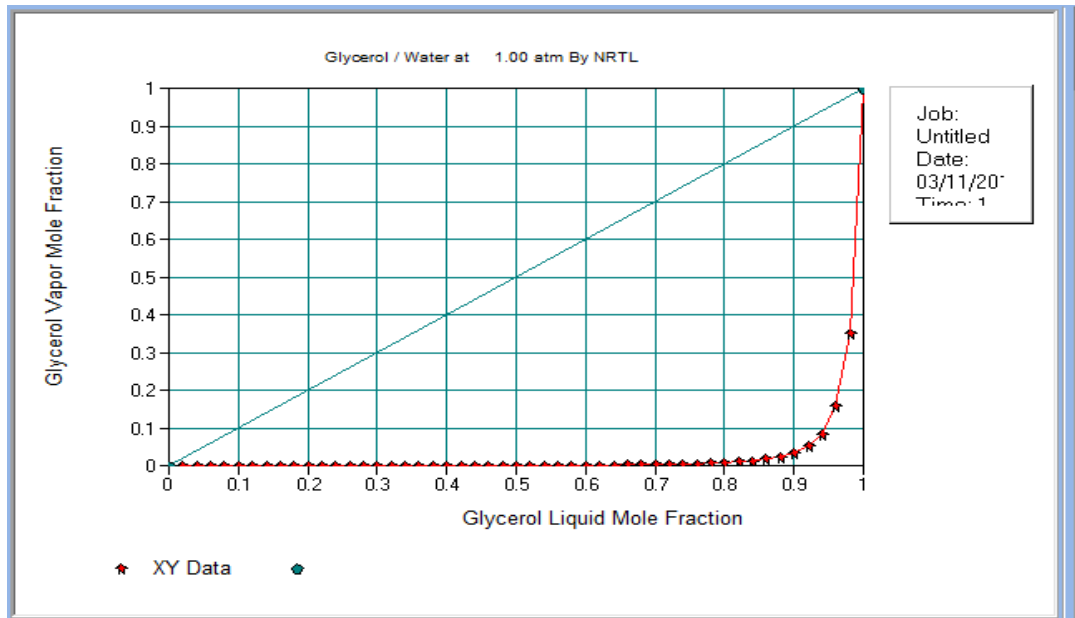


Fig. 4.1. Diagrama de curva de equilibrio: Glicerol-Agua a 1,00 atm
Fuente.- Simulador Chemcad V.6.2

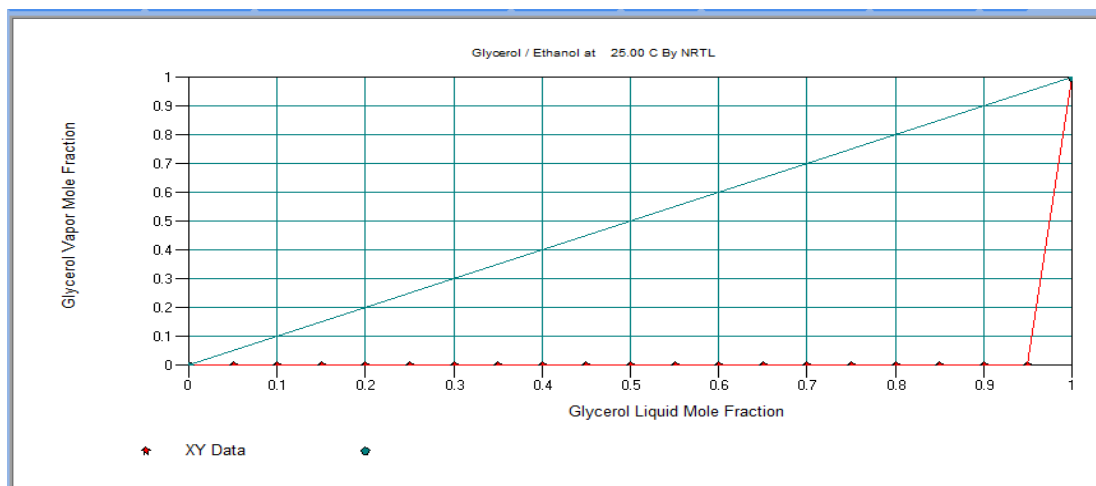


Fig. 4.2. Diagrama de curva de equilibrio: Glicerol-Etanol a 1,00 atm
Fuente.- Simulador Chemcad V.6.2

Como se puede notar, tanto en la fig.4.1 y fig.4.2, no existe formación de azeótropo en ninguno de los dos casos Agua vs Glicerol y Bioetanol vs Glicerol,

al tener el glicerol una temperatura de ebullición elevada con (290°C), respecto a estas dos sustancias, por lo tanto, no existirá formación de azeótropo ternario.

4.3. DIFICULTADES O RESTRICCIONES EN UNA COLUMNA EXTRACTIVA

Por seguridad, la operación de la columna debe satisfacer las siguientes restricciones:

- ✓ Evitar la inundación de la columna.
- ✓ Evitar el lloriqueo (para columnas de platos).
- ✓ Una caída de presión suficiente para mantener la operación de la columna, pero no exceder un valor permisible.
- ✓ Condición térmica adecuada para las corrientes de alimento. Esta condición se cumple indicando temperaturas, que estén por encima de la temperatura de la mezcla azeotrópica que se desea separar.

4.4. VARIABLES DEL PROCESO A TENER EN CUENTA

- ✓ Caudal del flujo propuesto.
- ✓ Composición del flujo que ingresa al diagrama de flujo a simular.
- ✓ Temperatura de los flujos al ingresar al sistema a simular.

4.5. CORRIENTES A CONTROLAR

- ✓ Composición de las corrientes de alimentación, se debe tener en cuenta la relación solvente/alimento azeotrópico.
- ✓ Controlar la composición del componente ligero en la corriente de fondos, y el componente pesado, tanto en la columna extractiva, como en la corriente recuperadora.
- ✓ Controlar una temperatura en la sección de rectificación de la columna y una temperatura en la sección de agotamiento de ambas columnas.

- ✓ Controlar la temperatura en ambas corrientes: en la columna extractiva, la temperatura de alimentación del solvente, debe estar entre la temperatura de ebullición del solvente puro y la mayor temperatura del componente pesado de la mezcla agua-bioetanol, que en este caso es 100°C, que corresponde al agua.
- ✓ Controlar los reflujos de ambas columnas, en este caso los reflujos son bajos, si se incrementan estos reflujos, se incrementan los consumos energéticos del proceso.
- ✓ Muchos sistemas de destilación extractiva, muestran una alta sensibilidad a pequeños cambios en las condiciones de operación.
- ✓ Los pequeños cambios producidos en los productos de residuo pueden cambiar considerablemente la temperatura de la columna y los requerimientos para el solvente extractor.
- ✓ Los pequeños cambios en la relación del reflujo pueden cambiar drásticamente la temperatura.
- ✓ Las pequeñas fluctuaciones en la presión puede mover la composición del producto de tope en la columna extractora.
- ✓ Las pequeñas pérdidas en la interface del decantador puede causar a que toda la secuencia de la columna se detenga.

CAPÍTULO V SIMULACIÓN EN ESTADO ESTABLE

5.1. INTRODUCCIÓN

El valor de entrada a simular, será el bioetanol azeotrópico obtenido en la planta piloto de alcohol a partir del jugo de caña, de acuerdo al siguiente procedimiento: Con las condiciones que se operan en la columna, se llega como producto final a la obtención de bioetanol, con una concentración de 89% en peso (96,4 % en volumen), valor que servirá para alimentar al sistema virtual, para luego ejecutar la simulación y obtener un bioetanol carburante.

5.2. PROCESO DE DESHIDRATACIÓN DEL BIOETANOL

En este capítulo se explicará el proceso de destilación extractiva. Se describe la simulación del proceso de producción de la deshidratación del bioetanol en estado estable y el equipo que integra la secuencia.

También se discute cómo se seleccionó el modelo de equilibrio de fases utilizado en la simulación de acuerdo a un análisis de datos experimentales del comportamiento de la mezcla ternaria etanol - Agua - Glicerol y los problemas inherentes a la implementación y simulación de procesos complejos, tales como: la multiplicidad de estados y la alta sensibilidad a pequeñas perturbaciones en la presión y temperatura de operación.

5.3. SOFTWARE DE SIMULACIÓN CHEMCAD.

Chemcad, es el sistema de simulación de estado estable, que puede ser utilizado para el modelado de una gran variedad de procesos industriales, incluyendo procesos químicos, petroquímicos y refinerías.

Chemcad incluye una amplia librería de modelos de unidades de operación que permiten una fácil interconexión para construir modelos de proceso personalizados.

Chemcad, está orientado a la industria de procesos, Química y Petroquímica, es el simulador que posiblemente sea uno de los más extendidos en la industria.

- ✓ Para implementar este proceso propuesto en la suite de simulación de Chemcad.
- ✓ Orientado al diseño y simulación de procesos en estado estable.
- ✓ Orientado a la simulación dinámica de procesos, así como el control del mismo.
- ✓ Para la predicción del equilibrio de fases.
- ✓ Para desarrollar modelos del equipo que integra un proceso y aplicarlos a la simulación, optimización y control de procesos continuos, por lotes o semi-continuos.

5.4. CONSTRUCCIÓN DE LA SECUENCIA.

El proceso está compuesto de:

- a) Líneas de ingreso y salida
- b) 02 columnas de destilación, con 19 platos y 06 platos.
- c) 01 Equipo de Mezclado.
- d) 01 Intercambiador de calor.
- e) 01 bomba para recirculación

1. Primero, seleccionamos las líneas de ingreso y salida.

- Línea de ingreso (color rojo).
- Línea de salida (color púrpura).

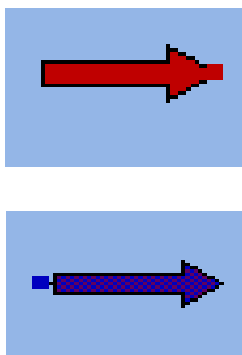


Fig. 5.1. Líneas de ingreso y salida

2. Segundo, seleccionamos las columnas de destilación.

Se utilizarán columnas del modelo “SCDS”, es un modelo riguroso para la simulación de todo tipo de operaciones de separación vapor-liquido de múltiples fases, estas operaciones incluyen: Destilación ordinaria, Absorción, Stripping, destilación Azeotrópica y extractiva.

Este tipo de columna, es un módulo de equilibrio múltiple, se especifica el número de etapas, la presión en el tope de la columna, la caída de presión en el tope de la columna, el tipo de condensador utilizado y, el número de etapas. Se debe seleccionar el método regular: Equilibrio líquido-vapor, este método supone etapas ideales. Los modelos de transferencia de masa de esta columna SCDS, no deben ser usados con el método termodinámico de electrolitos.

Se selecciona la ficha “Columns” donde ubicamos el modelo:

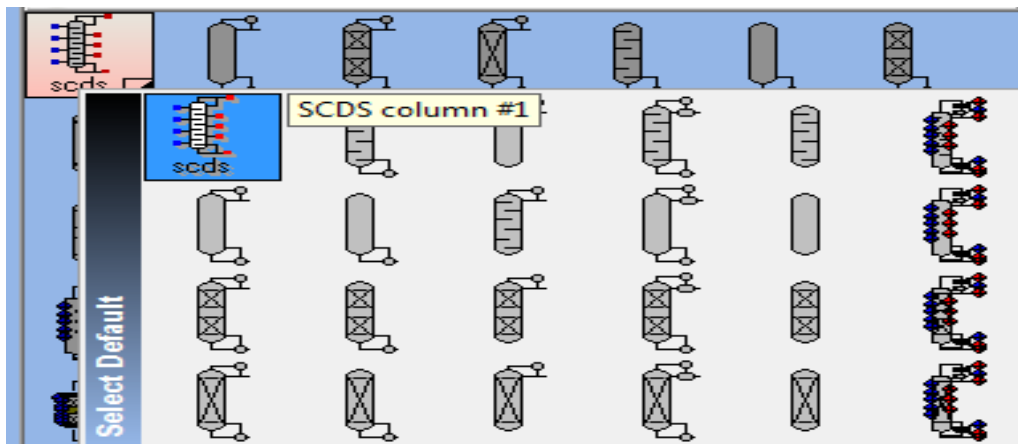


Fig. 5.2. Selección de columna de destilación

3. Tercero, seleccionamos las Bombas.

El modelo “Pump” está diseñado para manejar una sola fase líquida. Para casos especiales se pueden especificar cálculos de dos o tres fases, para determinar las condiciones de la corriente de salida o para calcular su densidad.

En el modo de operación, se introduce la presión de salida deseada y opcionalmente la eficiencia del equipo.

El modelo “Pump” puede ser utilizado para representar a una bomba o a una turbina hidráulica.

Los parámetros necesarios para su configuración son:

3.1 Tipo: bomba o turbina.

3.2 Incremento de presión o presión de salida.

En la sección “pallette” (donde se encuentran todas las unidades de operación), seleccionamos ficha “Pump”, arrastramos el “mouse” hasta la zona de trabajo y hacemos click.

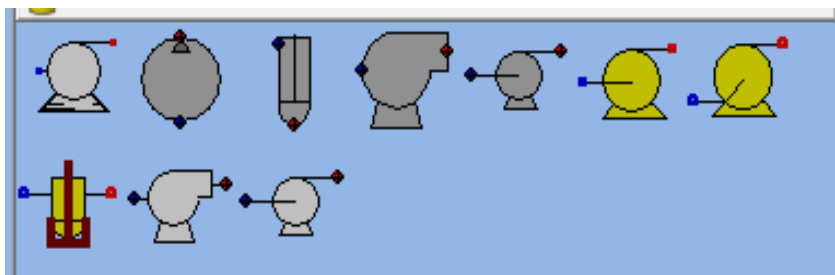


Fig. 5.3. Selección de bomba

4. Cuarto, seleccionamos los intercambiadores de calor.

En el modo de operación, se hace una especificación que se puede seleccionar de lo siguiente: Temperatura de una de las corrientes de salida, fracciones de vapor de una de las corrientes de salida, los grados de sobreenfriamiento o sobrecalentamiento de las corrientes, el calor intercambiado, o el coeficiente de transferencia de calor más el área del intercambiador, opcionalmente se puede indicar el número de equipos en serie, número de pasos en los tubos y en la coraza.

En la sección “pallette” (donde se encuentran todas las unidades de operación), seleccionamos ficha “Heat Exchanger”, arrastramos el “mouse” hasta la zona de trabajo y hacemos click.

5. Cinco, seleccionamos la interconexión.

Para completar el diagrama, de flujo, pueden establecerse conexiones a nivel de flujo de material, flujo de calor o flujo de trabajo.

En esta simulación solo necesitamos la conexión a nivel de flujo de material, pues no se realizan cálculos de equilibrio de energía o trabajo.

Se selecciona el elemento “Material Streams”, el cursor del ratón cambia a una cruz y al mover el cursor al área del equipo insertado, aparecen flechas donde la conexión puede ser colocada.

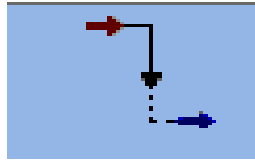


Fig. 5.4. Selección de línea de conexión

Así se insertan todos los equipos y se interconectan hasta que se obtenga el diagrama de flujo que se observa en la figura 5.5. Líneas abajo.

5.5. Construcción del Diagrama de Flujo simulado

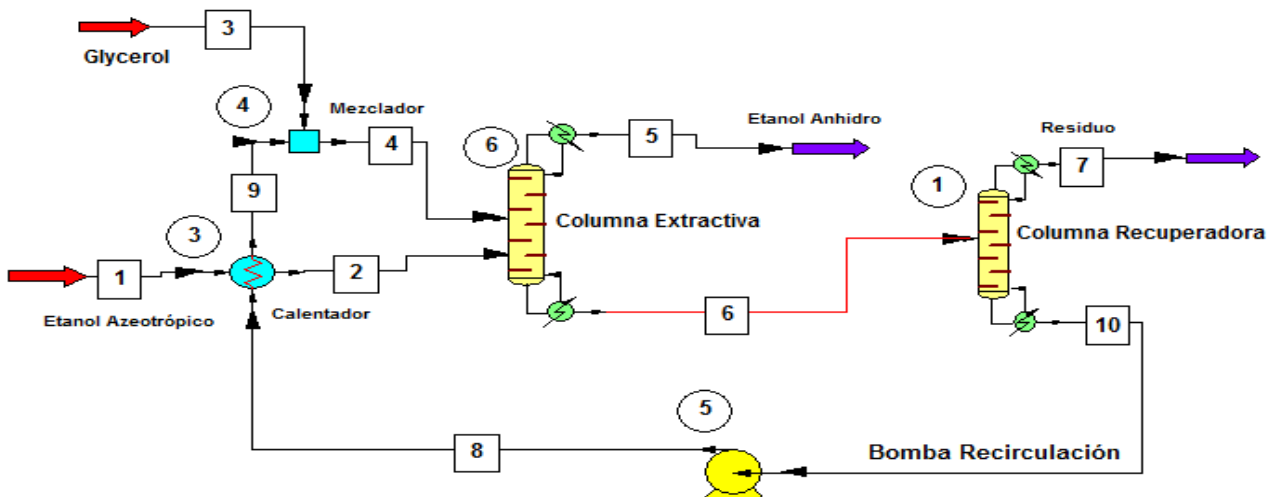


Fig. 5.5. Diagrama de flujo simulado: Elaborado por el grupo de trabajo

Fuente.- Elaboración propia

5.6. Parámetros de las corrientes de alimentación:

Corriente 1	
Nombre: bioetanol Azeotrópico	
Temperatura °C	78,2
Presión mm Hg	760
Flujo bioetanol (kmol/hr)	139,4627
Flujo Agua (kmol/hr)	17,23699
Flujo Total (kmol/hr)	156,6997

Corriente 3	
Nombre: Glicerol	
Temperatura °C	150
Presión mm Hg	760
Flujo Glicerol (kmol/hr)	40,00
Flujo Total (kmol/hr)	40,00

5.7. Parámetros de los equipos:

Equipo: Intercambiador de Calor	
Temperatura de Ingreso a la Columna °C	95

Equipo: Mezclador	
Presión de Salida	760 mm Hg

Equipo: Columna de destilación Extractiva	
Número de Etapas	18
Presión de tope de la columna, mm Hg	760
Alimentación de la corriente proveniente del Mezclador	Plato N° 3
Alimentación proveniente del Intercambiador de Calor	Plato N° 10
Relación de Reflujo	0,35
Fracción molar en la base del componente más volátil	0,0001

Equipo: Columna de destilación Recuperadora	
Número de Etapas	06
Presión de tope de la columna, mm Hg	15
Alimentación de la corriente proveniente de la Columna Extractiva	Plato N° 4
Relación de Reflujo	0,05
Fracción molar en la base del componente más volátil	0,0001

Equipo: Bomba de Recirculación	
Presión de Salida, mm Hg	1500
Eficiencia	1

5.8. Solvente empleado en el proceso de deshidratación:

El solvente escogido para realizar la simulación de la deshidratación del bioetanol, fue el Glicerol, por las consideraciones siguientes:

- ✓ La ventaja que presenta esta técnica respecto de la destilación azeotrópica, utilizada por mucho tiempo, radica en que el bioetanol obtenido no contiene trazas del agente de separación, lo que amplía su utilidad a productos alimenticios y farmacéuticos.
- ✓ Tiene un elevado punto de ebullición, razón por la cual no existe formación de nuevos azeótropos (ternarios, que pudieran ser heterogéneos u homogéneos; de acuerdo a la formación de dos o una fase).
- ✓ Al tener punto de ebullición elevado, altera la volatilidad relativa de la mezcla azeotrópica (etanol- agua), además garantiza el contacto con la mezcla a lo largo de toda la columna, además se debe adicionara la columna en etapa superior a la mezcla azeotrópica.
- ✓ Además, las características del agente de separación hacen que su búsqueda sea menos dispendiosa y restringida que en el caso de la destilación azeotrópica.

5.9. Descripción de la simulación:

Para realizar la simulación y obtener bioetanol carburante, con una concentración superior al 99,9 % de bioetanol, se realizó la construcción del diagrama de flujo simulado, empleando 02 columnas de destilación; la primera columna es la extractiva, donde alimentamos la mezcla azeotrópica en etapas distintas, siempre considerando que la alimentación proveniente del mezclador, debe estar por encima de la alimentación de la mezcla azeotrópica, el producto de fondo de esta columna,

que está constituido en mayor concentración por glicerol y en menores cantidades de agua y en muy pequeñas cantidades de bioetanol, es alimentado a la columna recuperadora de glicerol, mientras que por la parte del tope se obtiene bioetanol deshidratado.

En la columna recuperadora, donde el producto principal que va por los fondos de la columna que es glicerol, la dificultad que se pudo determinar es la pureza del solvente empleado, es decir libre de agua, no se pudo conseguir una pureza del 100%, se obtuvo un producto de fondos con trazas de bioetanol y trazas de agua; este producto es recirculado y nuevamente enviado a la columna extractiva, determinándose que no afecta la pureza del bioetanol obtenido en esta columna.

Para realizar el proceso de simulación, se empleó el modelo termodinámico NRTL, por ser el modelo que mejor correlaciona los datos empleados en el simulador, es decir con los datos empleados, el sistema converge.

Cuando se emplearon etapas por debajo del número establecido finalmente en la columna extractiva (18 etapas), manteniendo las etapas de alimentación de las corrientes provenientes del mezclador y del intercambiador de calor, no se obtiene la concentración deseada de bioetanol, que debe estar por encima del 99.5% para ser considerado como carburante.

Con respecto a las relaciones de reflujo, podemos decir que cuando incrementamos las relaciones de reflujo en ambas columnas, tampoco obtenemos la concentración deseada de bioetanol; esta relación de reflujo, debe tener valores bajos, con la finalidad de no elevar los consumos energéticos del proceso.

Como se indicó líneas arriba, si se incrementa la relación de reflujo, también se incrementa el consumo energético, si variamos la relación de reflujo por encima de 0,35 obtenemos concentraciones de bioetanol en el producto de tope de la columna

extractiva, por debajo del valor deseado, esto también está en relación directa con la variación de la temperatura de entrada de la corriente proveniente del mezclador, por lo que se determinó que la relación de reflujo óptimo es de 0,35 y la temperatura de alimentación es de 150°C. En lo que se refiere a la columna recuperadora, se utilizó una presión de 15 mm Hg.

La relación Solvente/Alimentación, para obtener la concentración de bioetanol por encima del 99,9 % molar es de 0,2552, por último la cantidad de bioetanol carburante obtenido en la columna extractiva es de 139,4324 kmol/hr (6423.512 kg/hr), y la cantidad alimentada al proceso es de 139,4627 kmol/hr (6424.908 kg/hr), por lo que el porcentaje de recuperación fue del 99,97 %.

5.10. Resultados obtenidos:

Después de realizar la simulación, se obtuvieron los siguientes resultados en las diferentes corrientes del proceso.

Stream	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
kmol/hr	156,69	156,69	40,0	285,65	139,50	302,85	58,97	245,65	245,65	245,65
kh/hr	6735,4	6735,4	3683	26306	6424.8	26616	3975	22622	22622	24565
T °C	78,2	95,0	150,0	9003	78,3	213,3	44,48	174,5	80,0	174,5
P mm Hg	760,0	760,0	760,0	760	760	760	15	1500	760	15
Vapor*	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Entalp**	-40,4	-34,43	-24,12	-176,5	-35,8	-171,5	-29,6	-146,4	-152,4	-146,4

*No existe formación de vapor en el sistema, por lo que la fracción de vapor en todas corrientes es 0,00

**La Entalpía esta en MMBtu/hr.

Balance de Materia Total en el sistema

ENTRADA (kmol/hr)		SALIDA (kmol/hr)	
Glicerol	40	Glicerol	40,0
Bioetanol	139,463	Bioetanol	139,463
Agua	17,237	Agua	17,237
TOTAL	196,70		196,70

CONCLUSIONES.

1. Se identificaron las diferentes técnicas del proceso de deshidratación de bioetanol azeotrópico, tales como: Destilación azeotrópica, con formación de azeótropos ternarios homogéneos y heterogéneos; destilación extractiva, donde se adiciona un tercer componente que altere la volatilidad relativa de la mezcla azeotrópica, es decir que no presente formación de azeótropo binario con ninguno de los dos componentes a separar, por lo tanto su temperatura de ebullición debe ser muy superior a los dos componentes.
2. Se empleó destilación extractiva, empleando glicerol como solvente.
3. Elaboramos el diagrama de flujo simulado, consistente de dos columnas (una columna extractiva y columna recuperadora de glicerol, además se utilizó 01 intercambiador de calor, 01 bomba de recirculación de solvente y un equipo de mezclado, con el fin de mezclar el glicerol fresco con la corriente proveniente del intercambiador de calor.
4. Las características de la sustancia alimentada al simulador son:
La sustancia a separar fue el bioetanol azeotrópico cuya composición es de 89 % de bioetanol y 11 % de agua, como solvente se empleó glicerol, su fórmula molecular es $C_3H_8O_3$, nombre (IUPAC) es 1,2,3-triolpropano, punto de ebullición es de 290°C, es un líquido incoloro, cuya presión de vapor es de $1,58 \times 10^{-4}$ mm Hg.
5. Elaboramos el diagrama de flujo, como se explica en el ítem 5.5.
6. Una vez elaborado el diagrama de flujo simulado, insertamos los datos en las corrientes de alimentación, así como en los diferentes equipos, para posteriormente ejecutar la simulación.

7. Después de varias iteraciones, el sistema llega a converger con los datos insertados en cada corriente de alimentación y equipo, lográndose un 99,98 % porcentaje de recuperación de bioetanol alimentado, con una concentración de 99,947 fracción mol de bioetanol, con un flujo de 139,5061 kmol/hr (6424,843 kg/hr).

RECOMENDACIONES

1. El programa puede ser utilizado para los diferentes cursos que se dictan en el área de Ingeniería, transporte de fluidos, transferencia de calor, transferencia de masa (destilación binaria, destilación de multicomponentes, absorción de gases, extracción líquido-líquido, extracción líquido-sólido, etc).
2. El software Chemcad, no es un paquete informático sofisticado, por su versatilidad y diferentes aplicaciones, por lo que se recomienda su uso permanente, especialmente en la simulación de procesos químicos, con el fin de diseñar, modificar, monitorear; procesos existentes o procesos químicos nuevos para obtener un determinado producto.
3. En cuanto a requisitos previos, es recomendable tener una base sólida en Operaciones Unitarias, Termodinámica del equilibrio, Fundamentos de Química-Física. Para el uso del simulador comercial CHEMCAD, es recomendable que el alumno tenga un buen conocimiento de un nivel mínimo de informática a nivel de usuario.
4. Incorporar las nuevas tecnologías de innovación docente en la impartición de las enseñanzas de nivel medio y superior.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

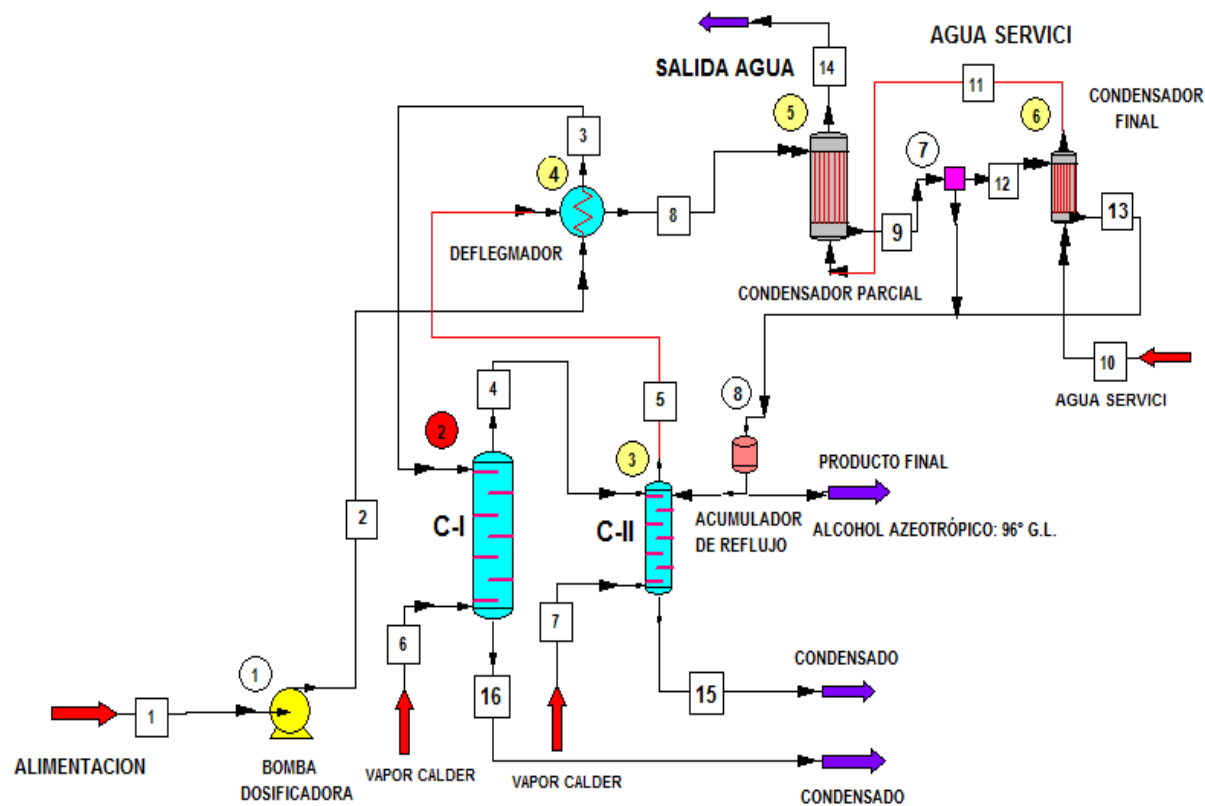
1. McCabe, W.;Smith, J.;Harriot, P. Operaciones unitarias en ingeniería química. Editorial McGraw Hill, cuarta edición. Ciudad México D.F. País, México1998.
2. Otto, Leidinger.. Procesos Industriales. Fondo Editorial. Ciudad, Lima. País, Perú. 1997
3. Perry, Green.. *Manual del Ingeniero químico*. Editorial McGraw Hill, cuarta edición, tomo V. Ciudad, Madrid. País, España. 2001
4. Smith, Van Ness, Abbott. Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química. Editorial McGraw Hill, Quinta edición. Ciudad México D.F. País, México1997.
5. Cerpa M.: “Producción del bioetanol carburante como aditivo para la gasolina a partir de la caña de azúcar de la región del río huallaga”, Universidad de Valladolid, Valladolid, España. 2003.
6. Scenna, J. Nicolás. “**Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos**”, 2ª edición, Editorial de la Universidad Tecnológica. 1999.
7. Nacional, Buenos Aires Argentina Cornejo, Miguel: Optimización de parámetros de operación de equipos, sistemas de generación y transporte de energía en la Refinería Iquitos. Tesis. Iquitos, 2006.
8. Chemcad User Guide, Tech Inc., Septiembre de 2006.
9. Faires, V. M., “Termodinámica”, UTEHA, S.A. de C.V. 1992.
10. Felder, R. M. y Rousseau, R. W. “Principios Elementales de los Procesos Químicos”, Addison-Wesley Iberoamericana S.A., 1986.
11. Holland, Ch. D. “Fundamentos de destilación de mezclas multicomponentes”, Editorial Limusa, S.A. de C.V. 1998.
12. Llerena, G. Tony: Modelado y Simulación de la planta piloto de alcohol de la Facultad de Ingeniería Química. Iquitos, 2009.

13. Mortaheb, H. and Kosuge, H. Simulation and optimization of heterogeneous azeotropic distillation process with a rate-based model. *Chemical Engineering and Processing*, 43:317–326. 2004.
14. Nolorbe M, José: Modelado y simulación de reactor químico con convección forzada. Tesis. Iquitos, 2011.
15. Prausnitz, J., Lichtenthaler, R., and Gomes, E. *Termodinámica molecular de los equilibrios de fases*. Prentice Hall. 2000.
16. Tello W, Pablos y Otros: Estudio de Prefactibilidad para la instalación de una planta industrial de bioetanol a partir de caña de azúcar en la Región Loreto. Tesis, Iquitos, 2013.
17. Treybal, R. *Mass Transfer Operations*. McGraw Hill. 1981.
18. Martínez Sifuentes, Víctor Hugo, y col **“Simulación de Procesos en Ingeniería Química”** (2000); Plaza y Valdés Editores, México, Tamaulipas, 1998.

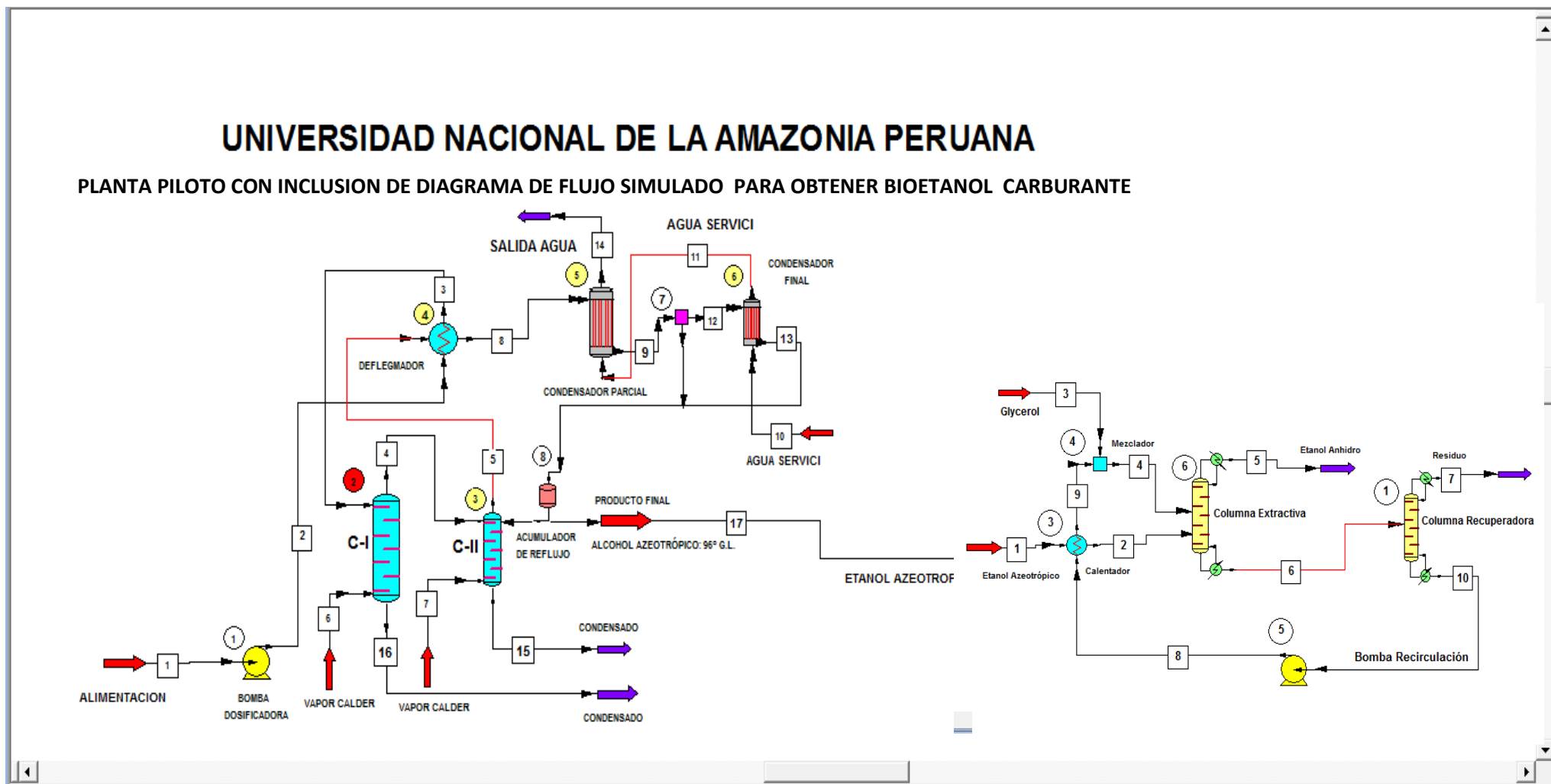
ANEXOS

Anexo N° 01: Diagrama de la Planta Piloto de Alcohol

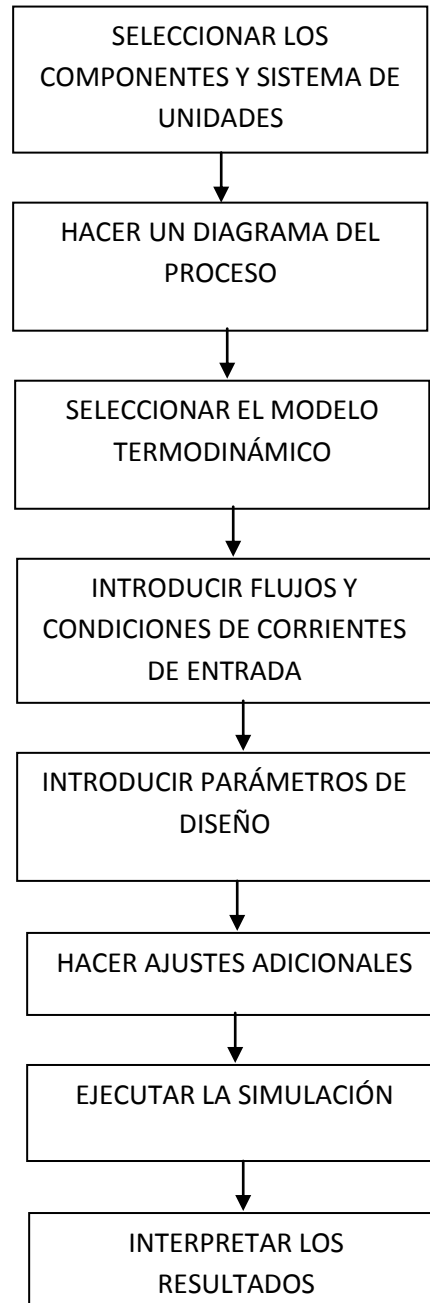
UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA AMAZONIA PERUANA PLANTA PILOTO DE ALCOHOL



Anexo N° 02: Planta Piloto de Alcohol con inclusión de diagrama de flujo simulado para obtener bioetanol carburante



Anexo N° 03: Metodología para simular procesos en un simulador:



Anexo N° 04

PASOS PARA INICIAR LA SIMULACIÓN EN CHEMCAD

1. Hacer doble click, en el icono del software, que se encuentra en el escritorio (pantalla del PC)



2. INICIANDO UN NUEVO TRABAJO – LA VENTANA DE SIMULACIÓN

Comencemos abriendo un nuevo trabajo y dándole un nombre de trabajo. La orden File sirve para esto. Para abrir el menú File, dé un clic sobre la palabra File en la barra de menús.

Ahora escoja la opción New Job haciendo clic en ella. Se abre la siguiente caja de diálogo:

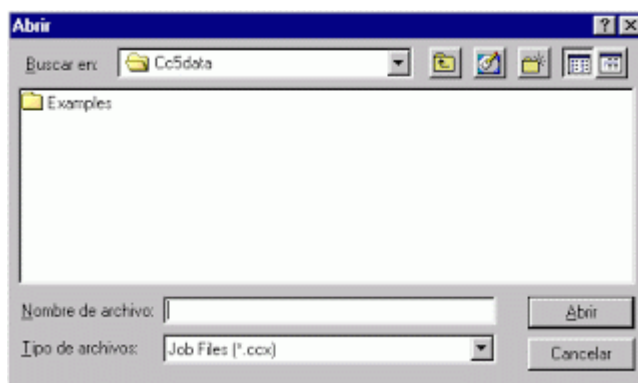
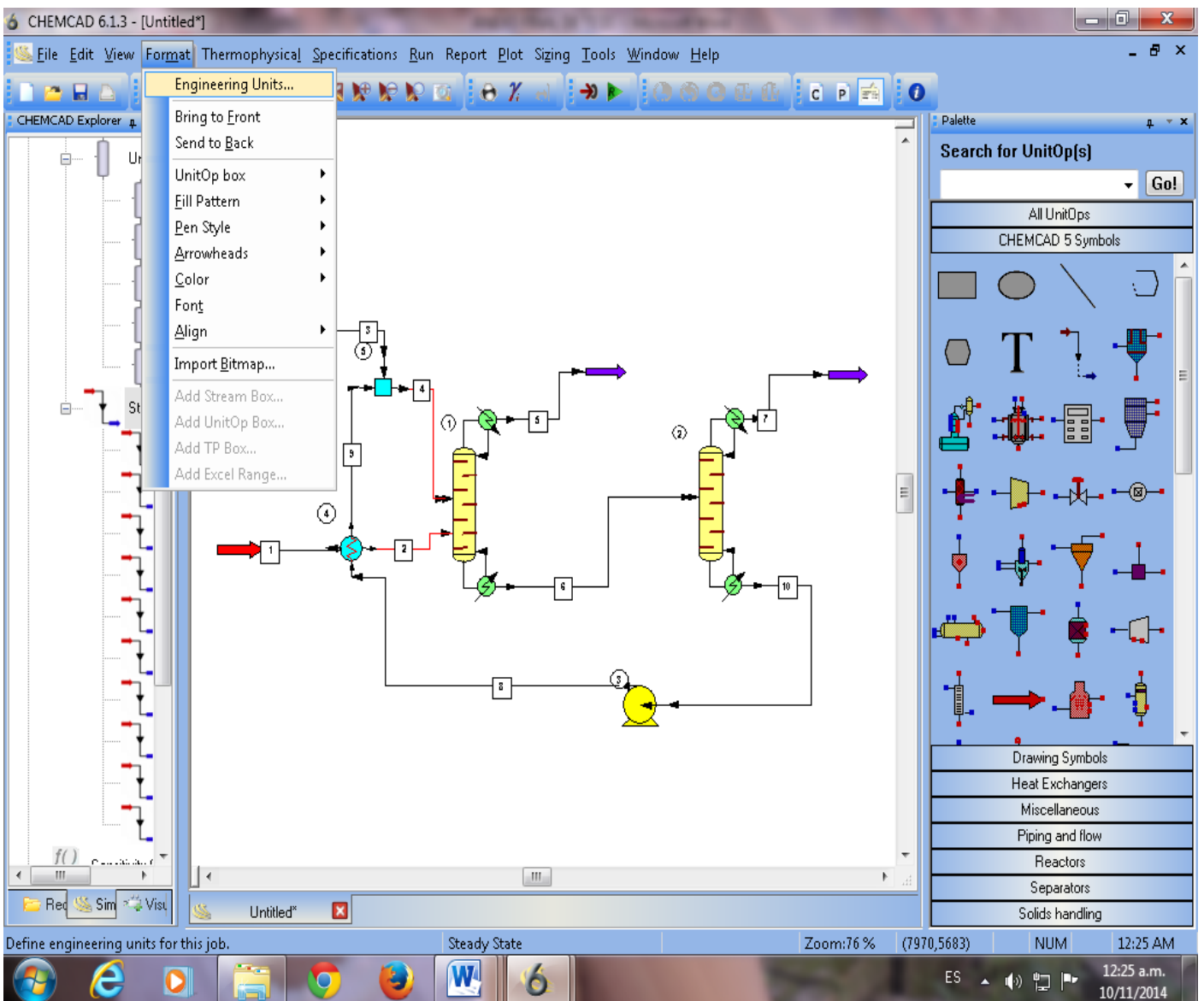


Fig. 3 Caja de diálogo para nuevo trabajo

Esta ventana de diálogo le advierte para introducir un nombre y carpeta para el nuevo trabajo. Usemos el nombre TUTOR1. Por favor introduzca este nombre

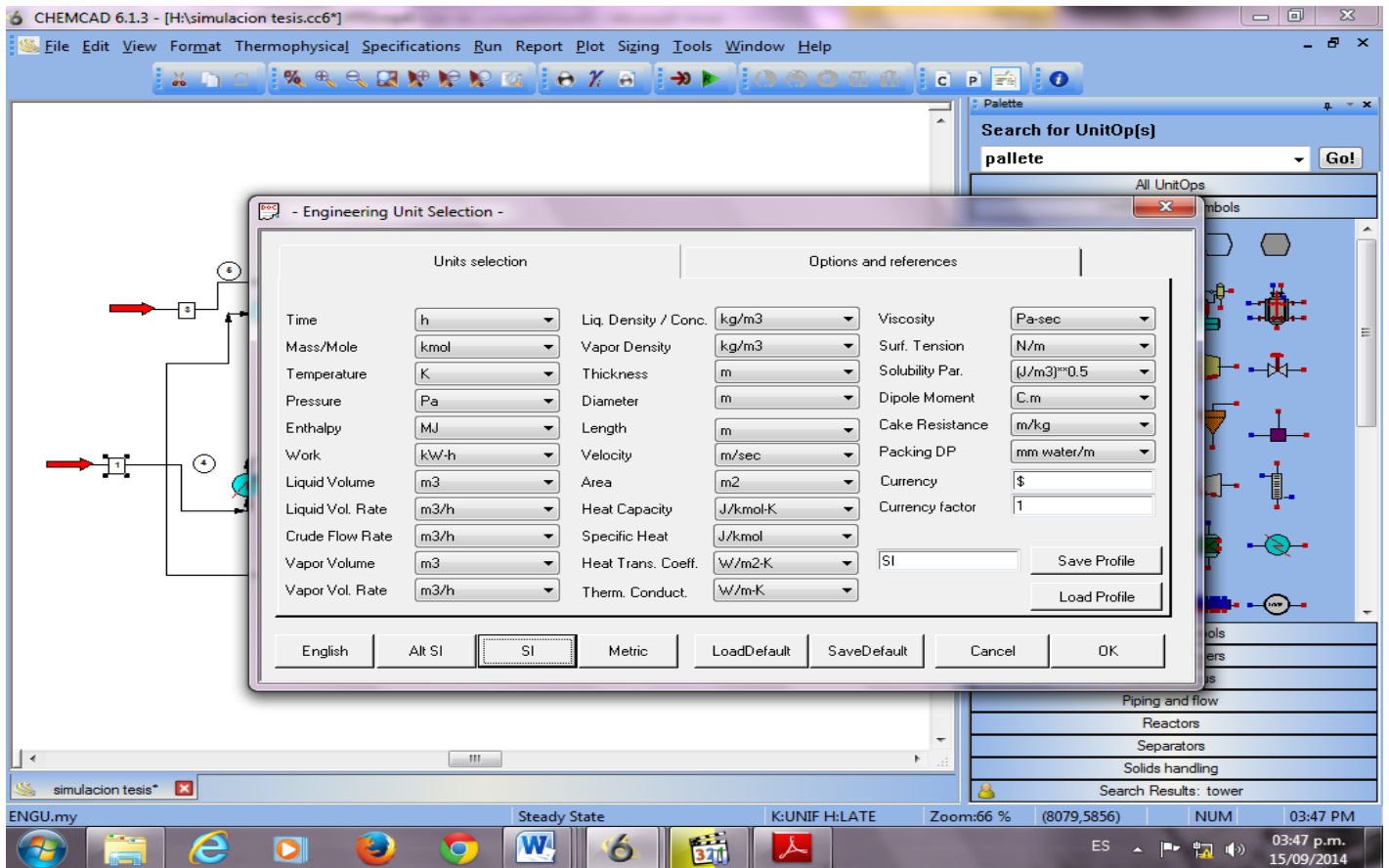
en el campo designado File Name. Luego cierre la ventana de diálogo haciendo clic en el botón [Save].

- **Selección de las unidades de ingeniería:** Hacemos click en la siguiente ventana “format”- “Engineering Units”.

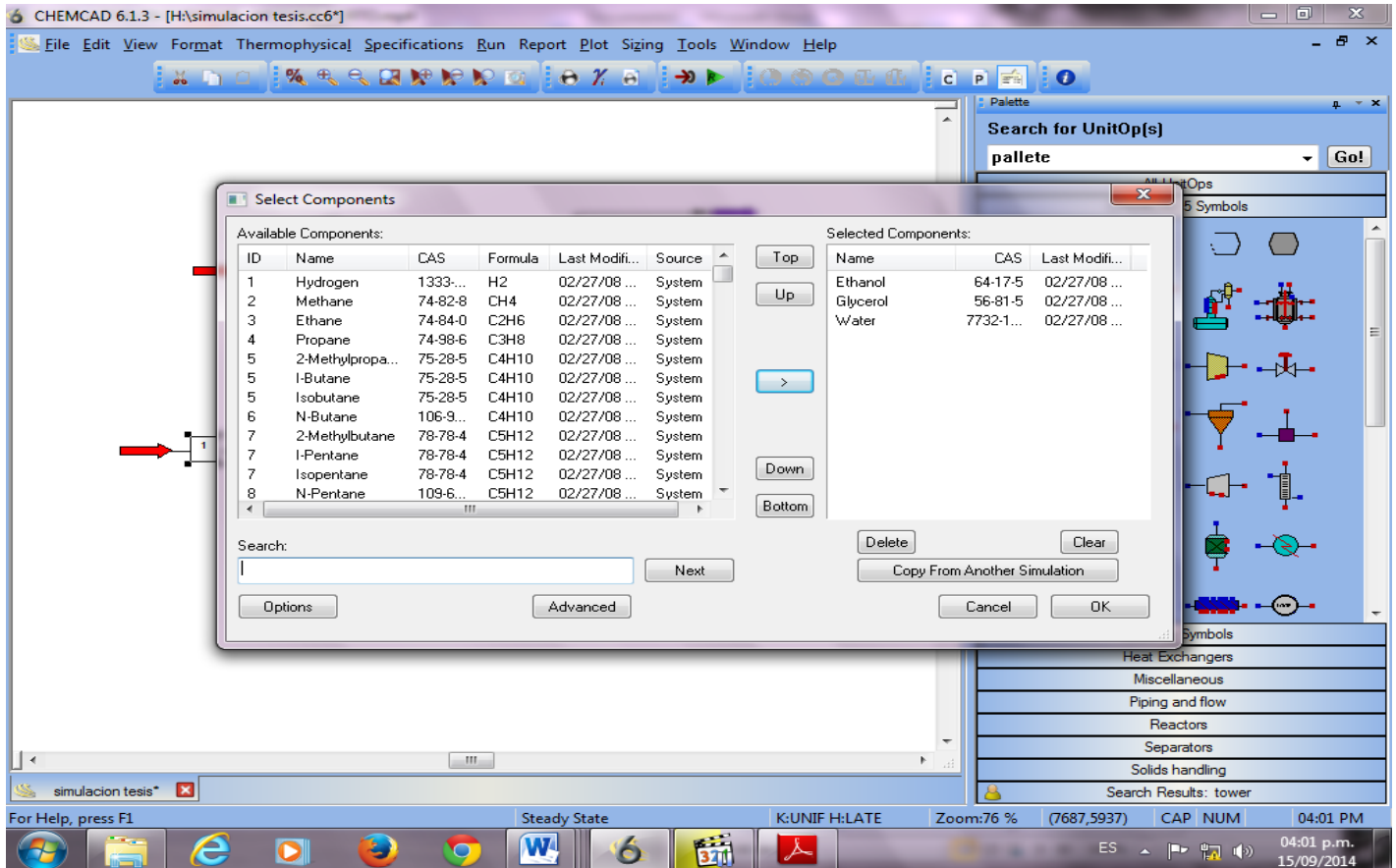


Automáticamente emergerá una ventana en la cual se hará click en sistema internacional “SI” luego “OK”.

SIMULACIÓN DE LA DESHIDRATACIÓN DE BIOETANOL AZEOTRÓPICO DE LA PLANTA PILOTO DE ALCOHOL DE LA FIQ-UNAP, MEDIANTE LA PLATAFORMA DE CHEMCAD V.6.2



- **Selección de los componentes de entrada a usar**, estas son etanol, agua y glicerol. Hacemos click en la ventana de “thermophysical”-“select Components”.

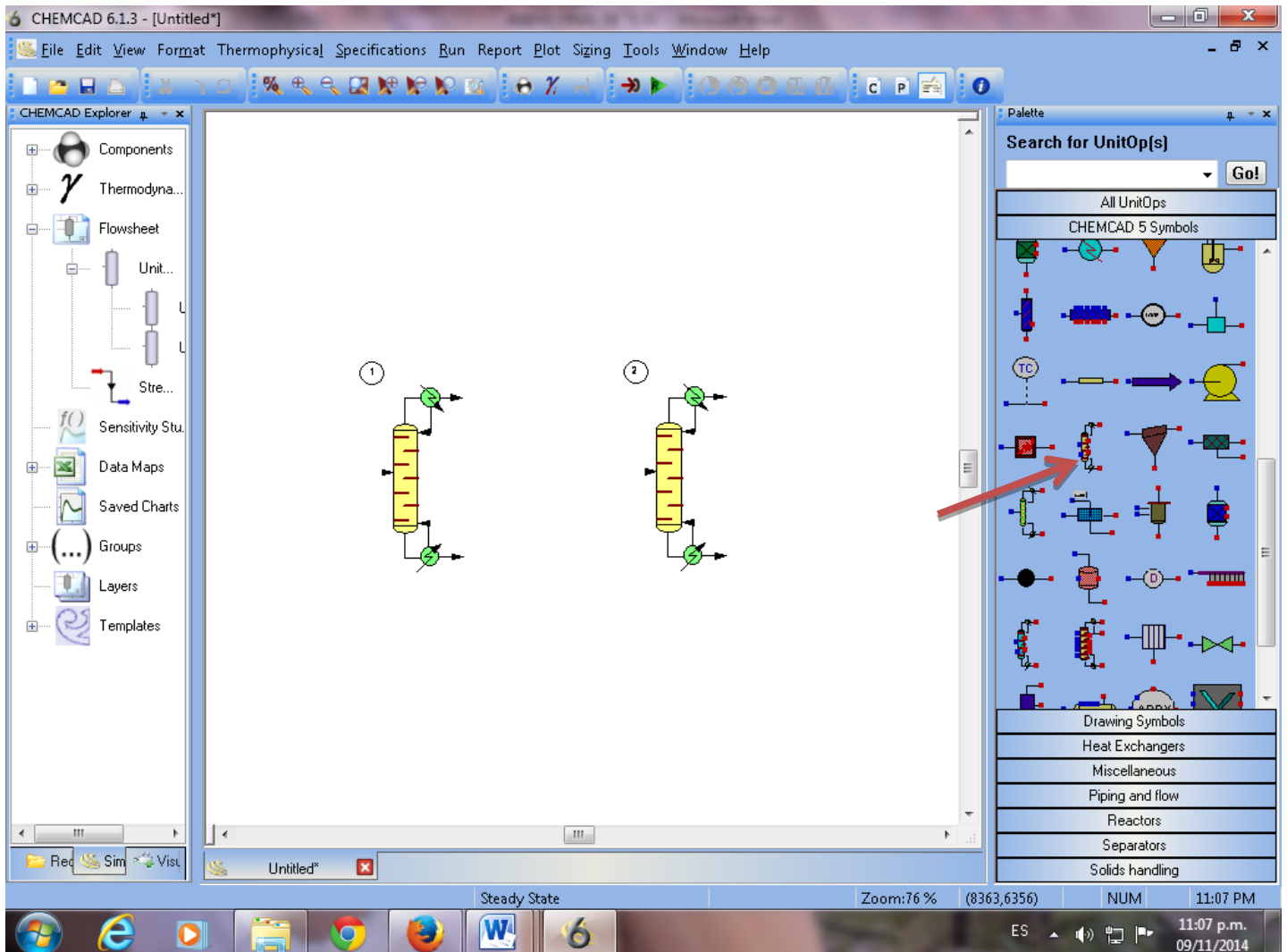


Automáticamente emergerán ventanas en las cuales tendremos que hacer click en “Ok” cada vez que emerjan dichas ventanas.

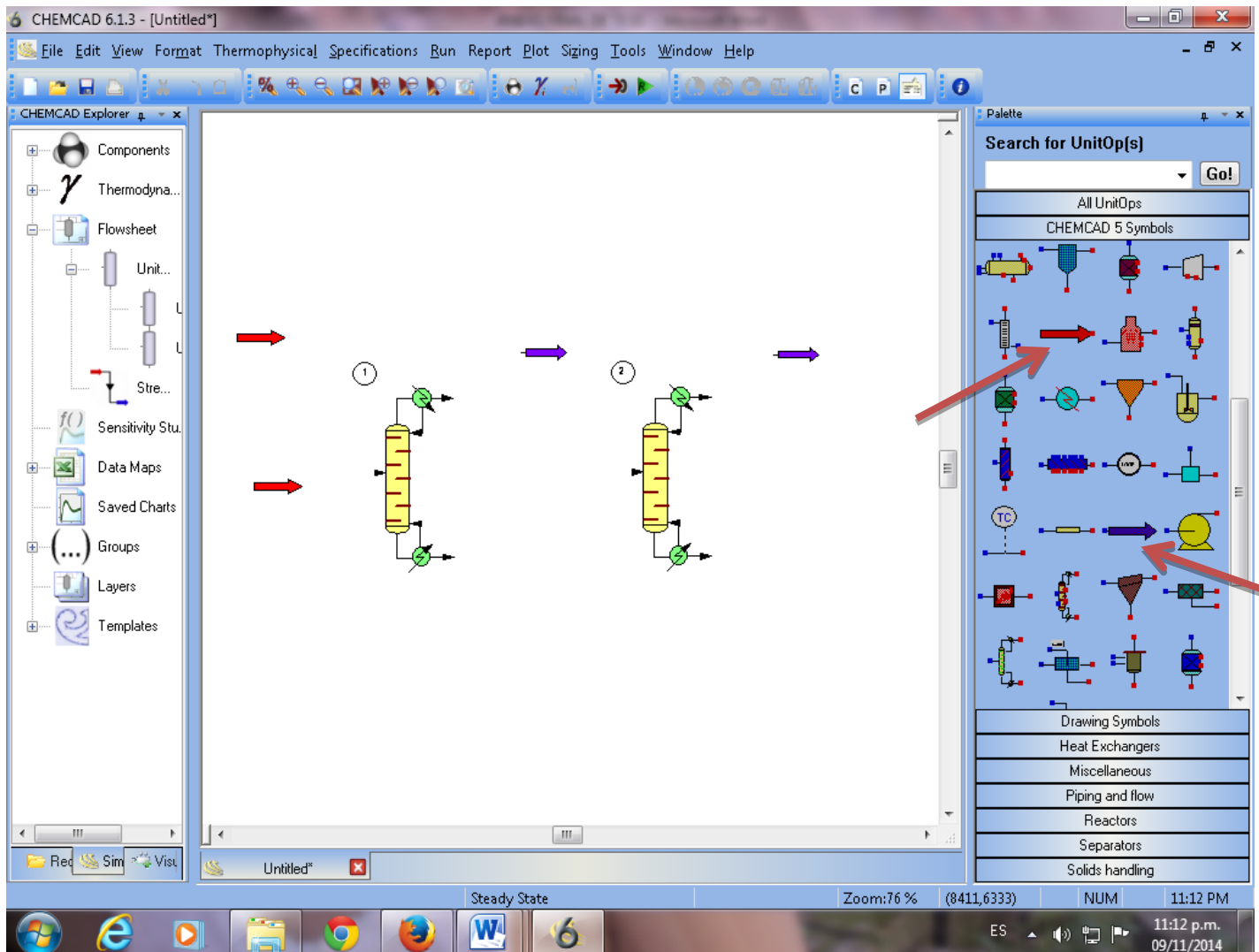
Elaboración del diagrama de flujo para obtención de bioetanol anhidro azeotrópico

1. A continuación seleccionamos los equipos y separadores para construir la secuencia del diagrama.

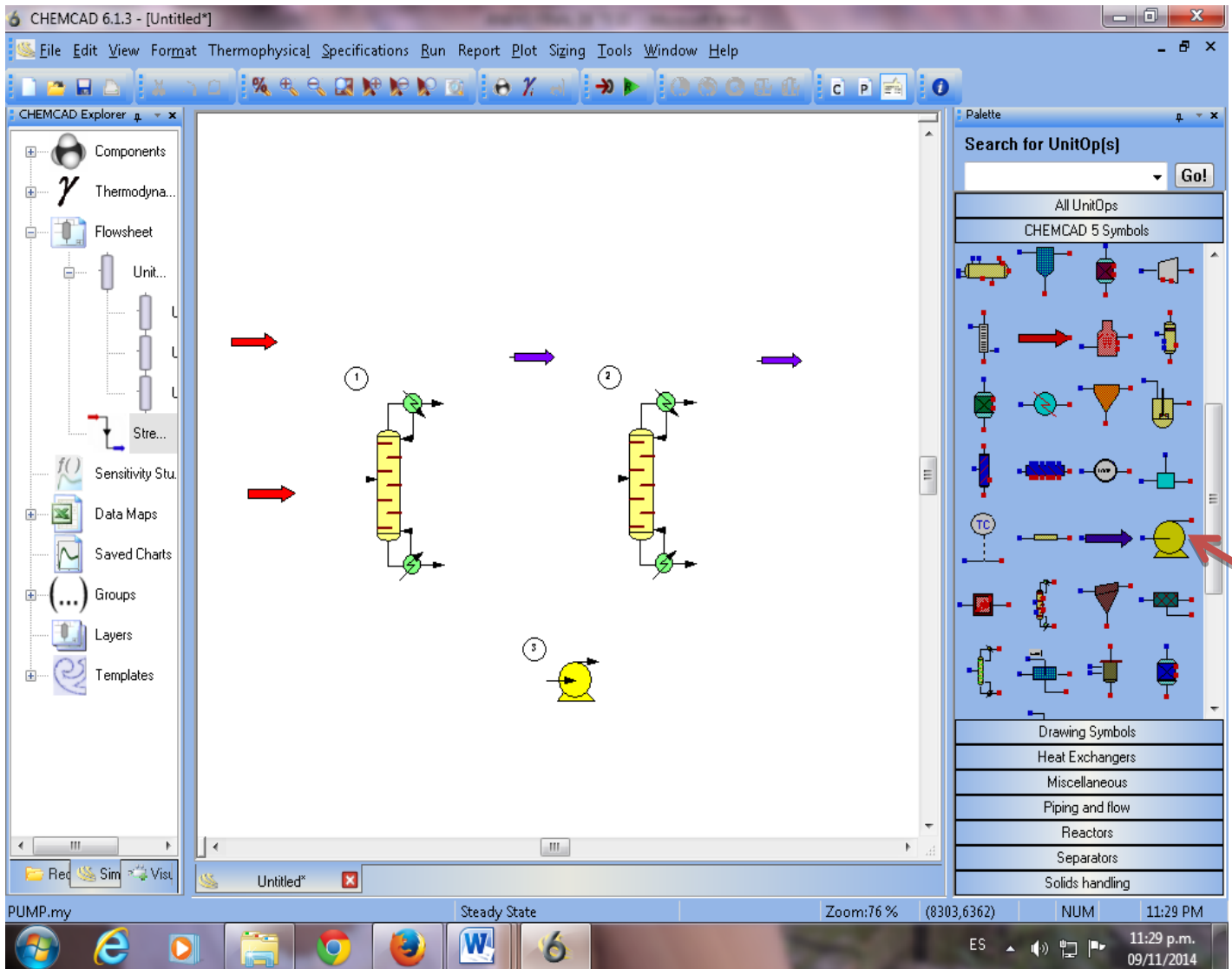
1.1. **Selección de los separadores.** A continuación seleccionamos el modelo “SCDS # 1”. Arrastrándolo al escritorio del software. Se necesitaran 2 columnas (1 columna extractiva y 1 columna de separación):



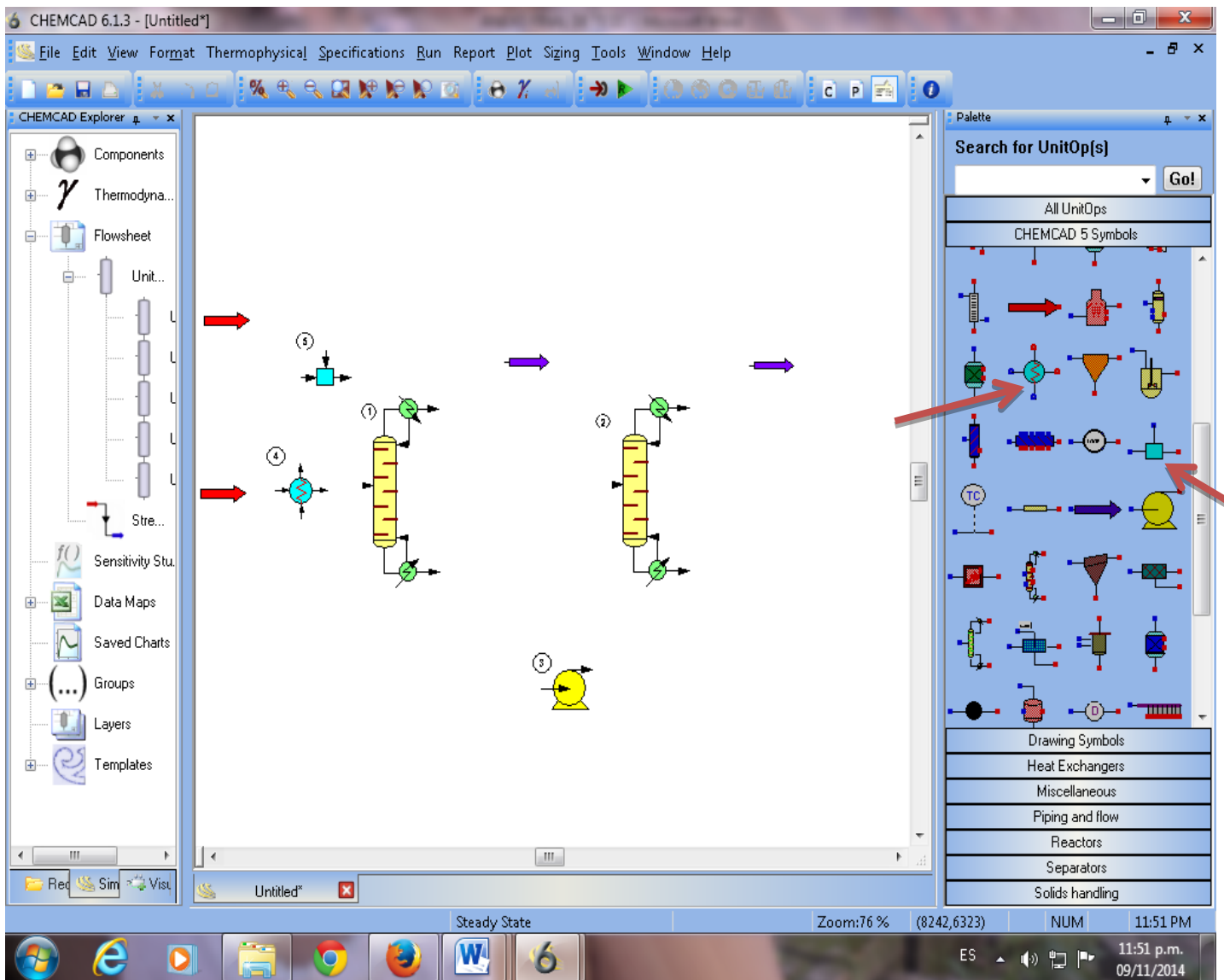
1.2. Selección de las líneas de alimentaciones y líneas de producto. A continuación seleccionamos las líneas de entradas y salidas de color rojo y púrpura respectivamente. Arrastrándolo al escritorio del software. Se necesitarían 4 (2 de entrada y 2 de salida):



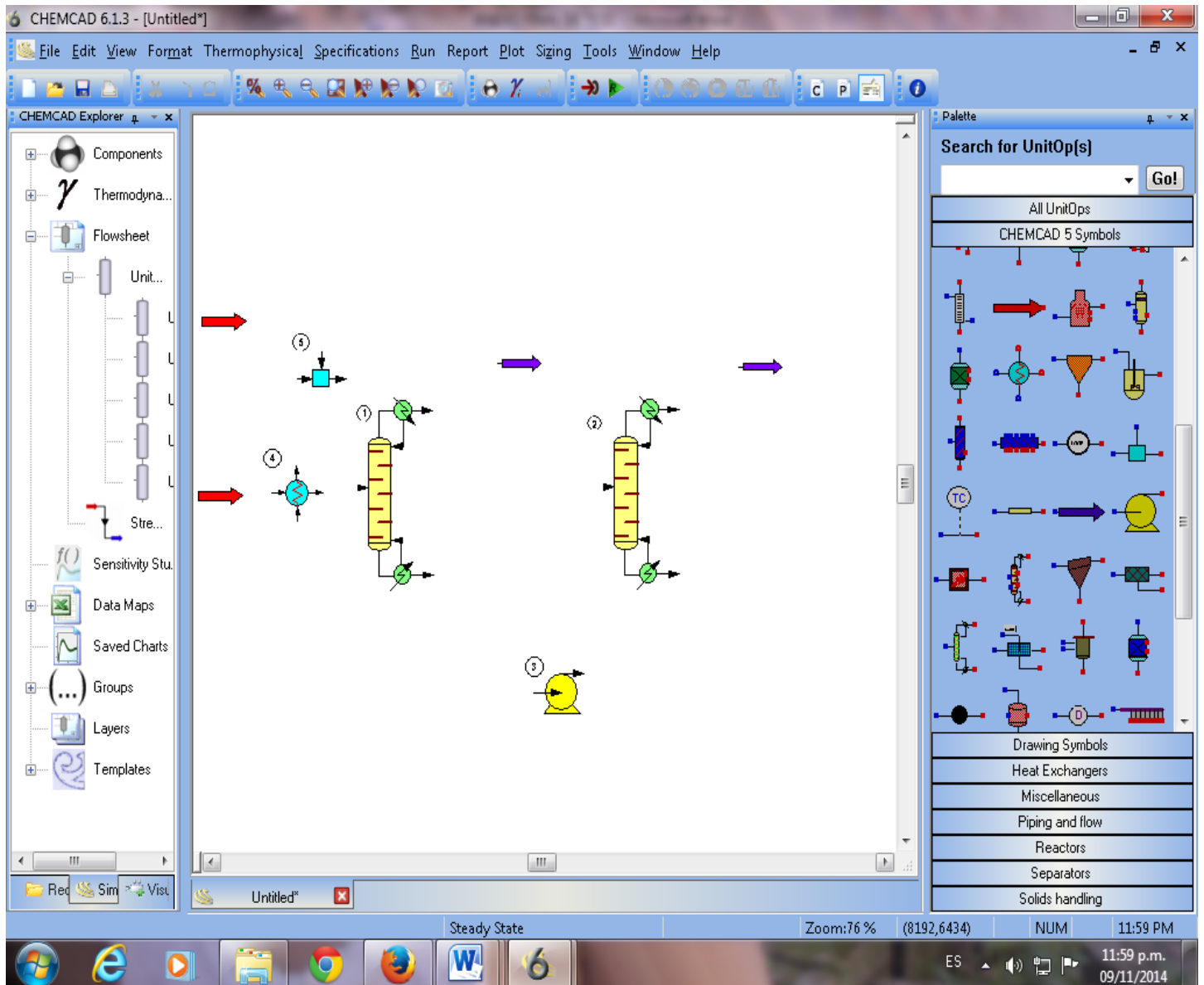
1.3. Selección de la bomba. A continuación seleccionamos la bomba “Pump #1”.
Arrastrándolo al escritorio del software.



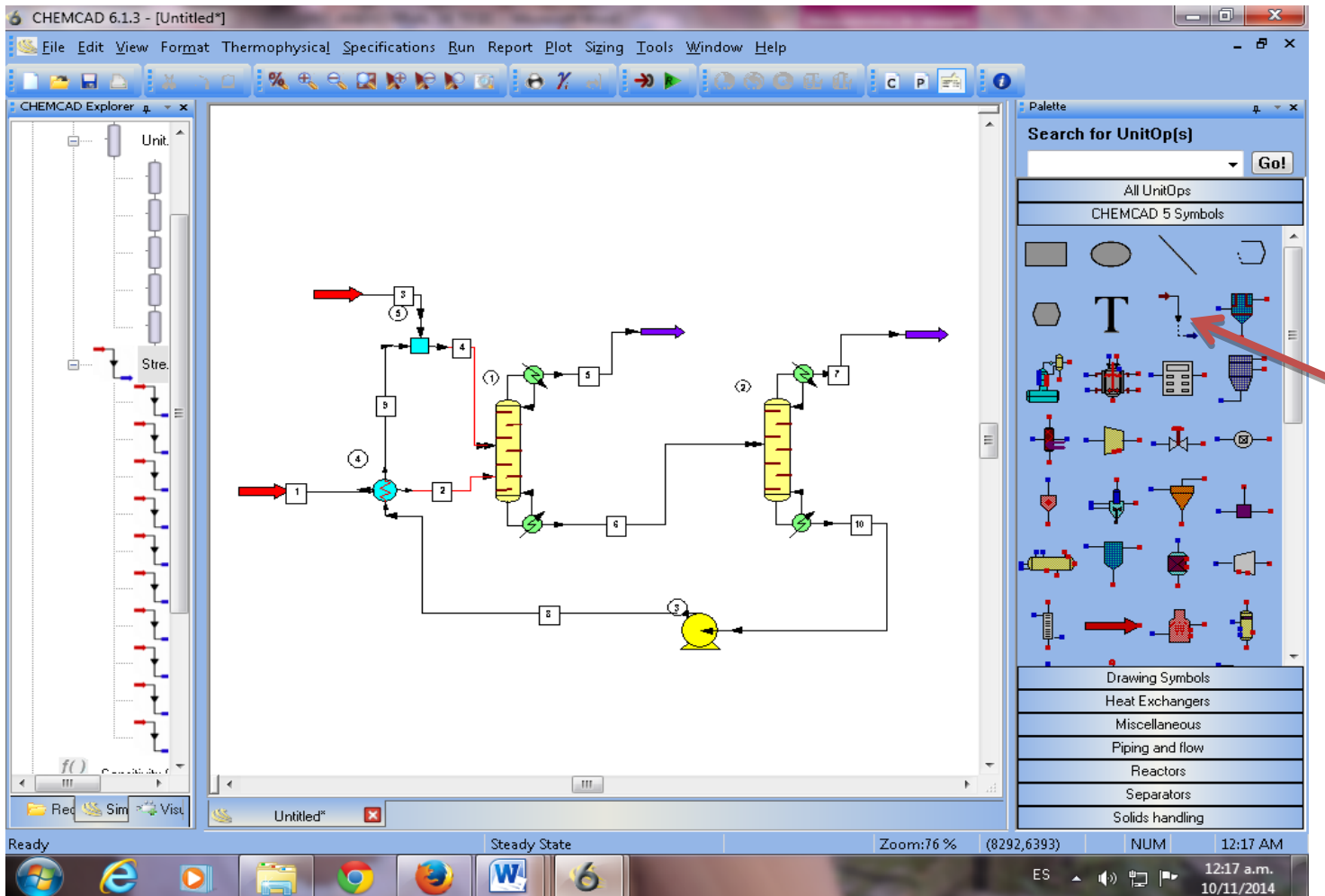
1.4. Selección del intercambiador y el mezclador. A continuación seleccionamos el intercambiador “Heat exchanger #6” y el mezclador “Mixer # 1”. Arrastrándolo al escritorio del software.



1.5. A continuación se procede a distribuir los equipos a sus respectivos lugares tal como se lo muestra:



- 1.6. Ya distribuidos en sus respectivos lugares, se procede a interceptarlos. Seleccionamos las corrientes “**Streams**”. Arrastrándolo al escritorio del software como se aprecia.



- Ingreso de parámetros a las corrientes de alimentación.** En la corriente 1 y 3, hacemos doble click sobre los pequeños cuadritos según numeración y automáticamente emergerá otra ventana, en esta se ingresan los flujos, temperatura y presión. Para luego hacer click en “Flash y Ok”. Ver páginas 68 y 69.

Bioetanol + Agua

The screenshot displays the CHEMCAD 6.1.3 interface. The 'Edit Streams' dialog box is open, showing the following data:

Stream No.	1
Stream Name	Bioetanol Az
Temp C	78.2
Pres atm	1
Vapor Fraction	0
Enthalpy MJ/h	-42628.51
Total flow	156.6997
Total flow unit	kmol/h
Comp unit	kmol/h
Glycerol	0
Ethanol	139.4627
Water	17.23699

The background process flow diagram shows a distillation column with a condenser. The condenser is labeled 'superadora' and has a 'Vapor GWE' outlet. The main feed stream is labeled 'Bioetanol Az' and is numbered '1'. There is also a 'Glycerol' input stream. The software interface includes a 'Palette' on the right with various unit operation symbols and a 'Search for UnitOp(s)' field.

Glycerol

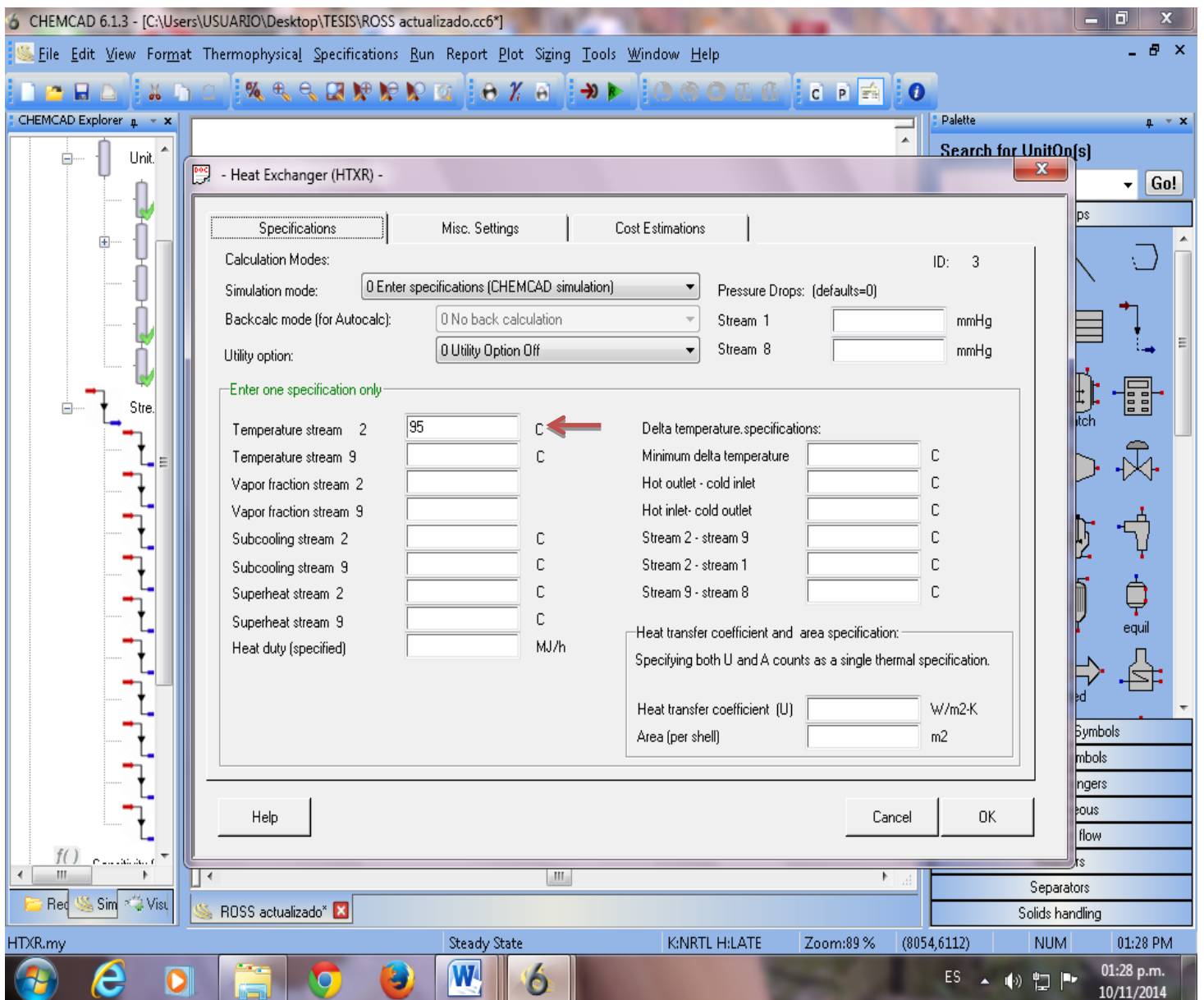
The screenshot displays the CHEMCAD 6.1.3 interface. The main window shows a process flow diagram with a unit labeled '1' and streams for 'Glycerol' and 'Bioetanol Az'. An 'Edit Streams' dialog box is open, showing the following data:

Property	Value
Stream No.	3
Stream Name	Glycerol
Temp C	150
Pres mmHg	760
Vapor Fraction	0
Enthalpy MJ/h	-25449.93
Total flow	40
Total flow unit	kmol/h
Comp unit	kmol/h
Glycerol	40
Ethanol	0
Water	0

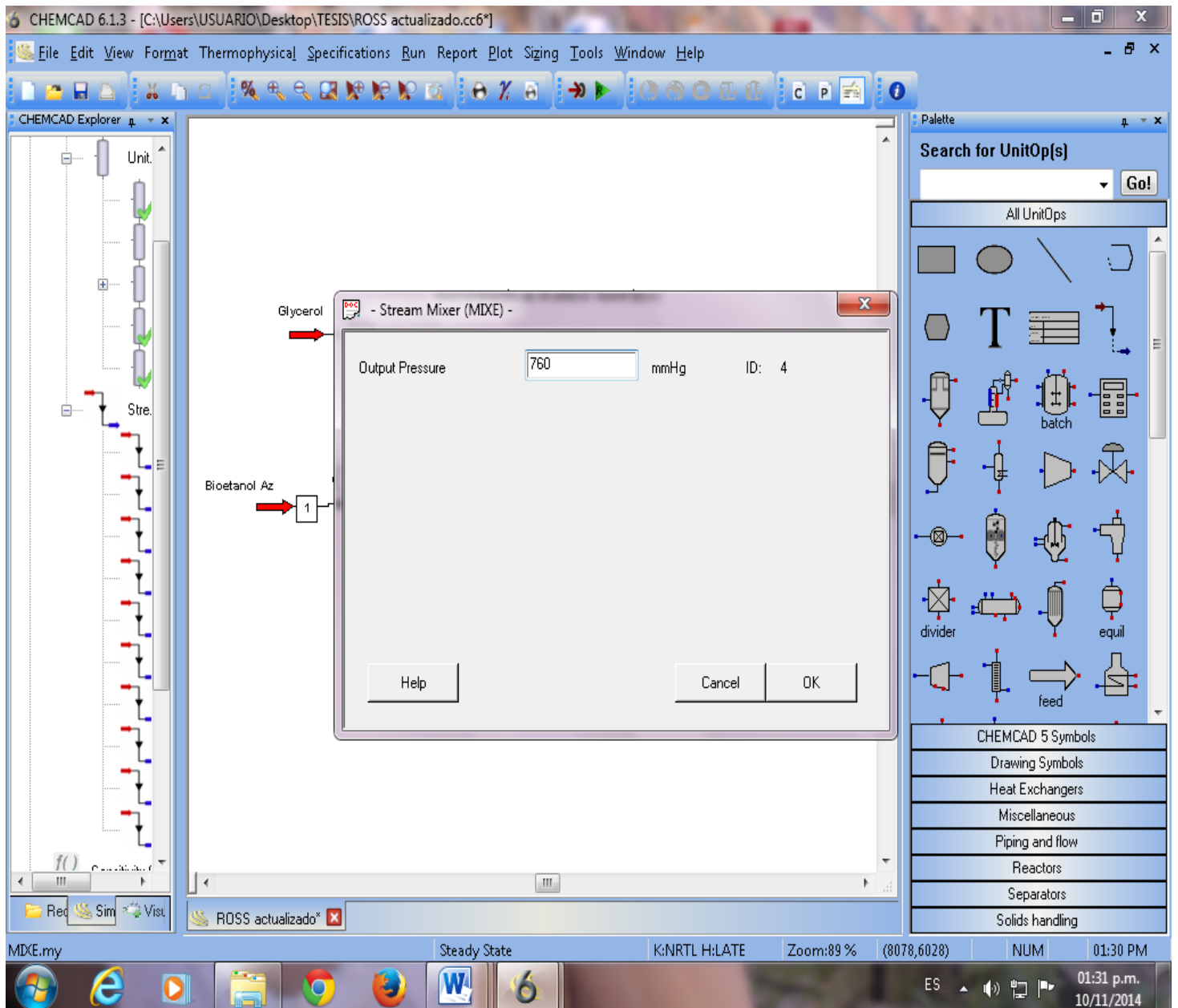
The background diagram shows a unit '1' with an input stream 'Bioetanol Az' and an output stream 'Glycerol'. The 'Glycerol' stream is connected to a separator unit '10' (labeled 'peradora'), which has two output streams: 'Vapor GWE' (stream 7) and another stream (stream 10).

3. Ingreso de parámetros a los equipos calentadores, mezclador, bomba y separadores. Hacemos doble click sobre los equipos y automáticamente emergerá otra ventana, en esta se ingresaran los datos según corresponda. Para luego hacer click en “Flash y Ok”:

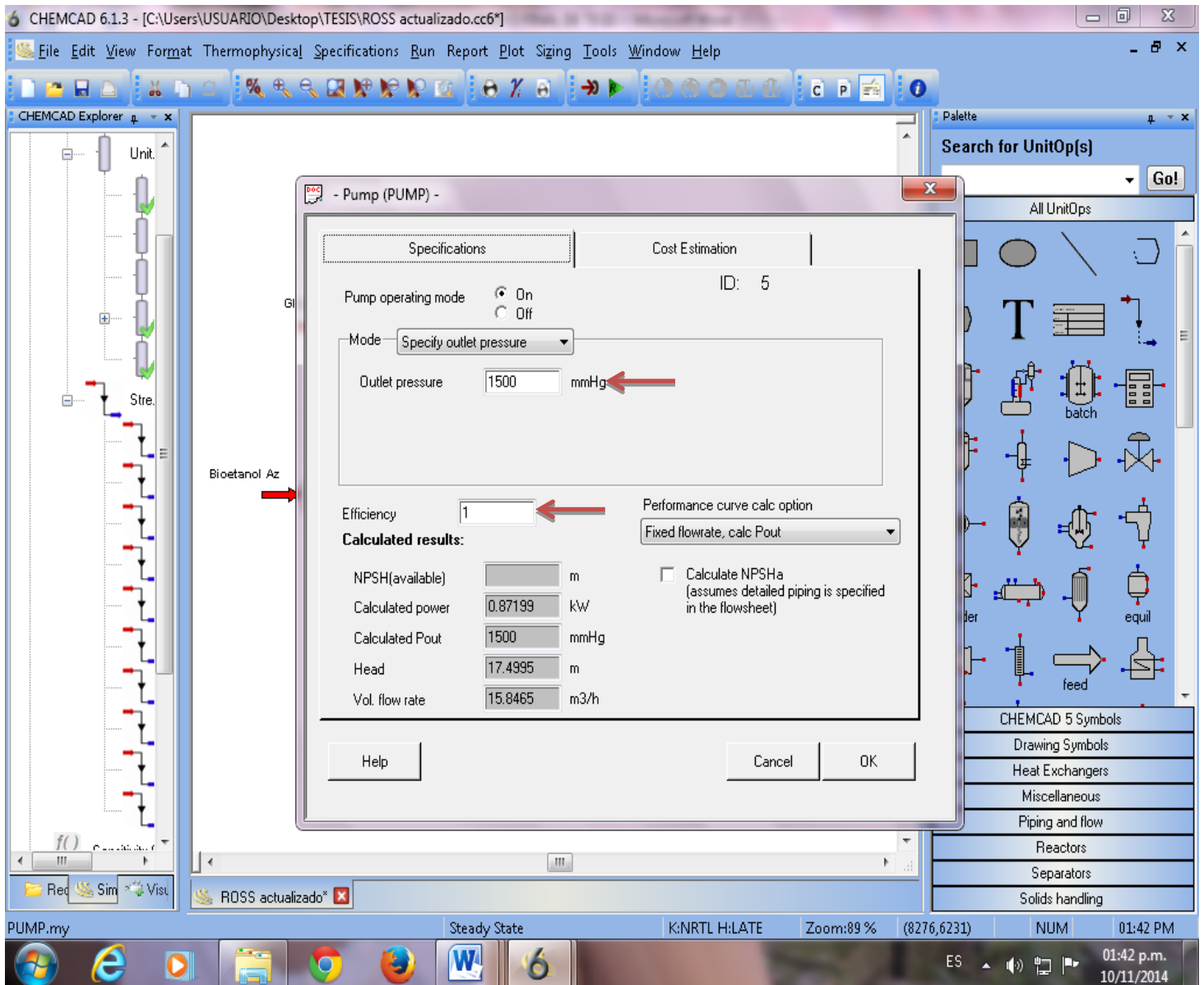
3.1. Intercambiador de calor que va directo a la primera columna de Extracción de la línea de alimentación. Ver parámetro en página 69.



3.2. Mezclador. Ver parámetro en página 69.

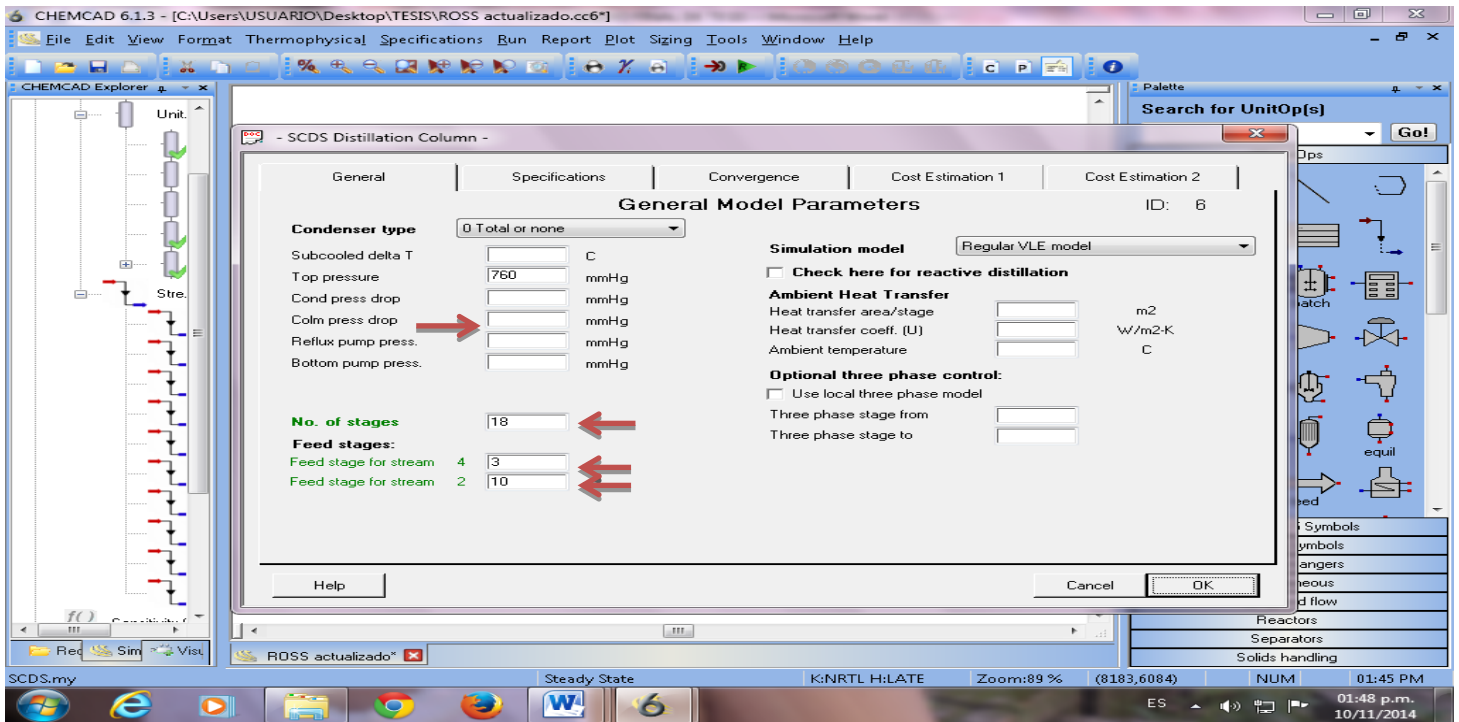


3.3. Bomba, ver parámetros en página 70.

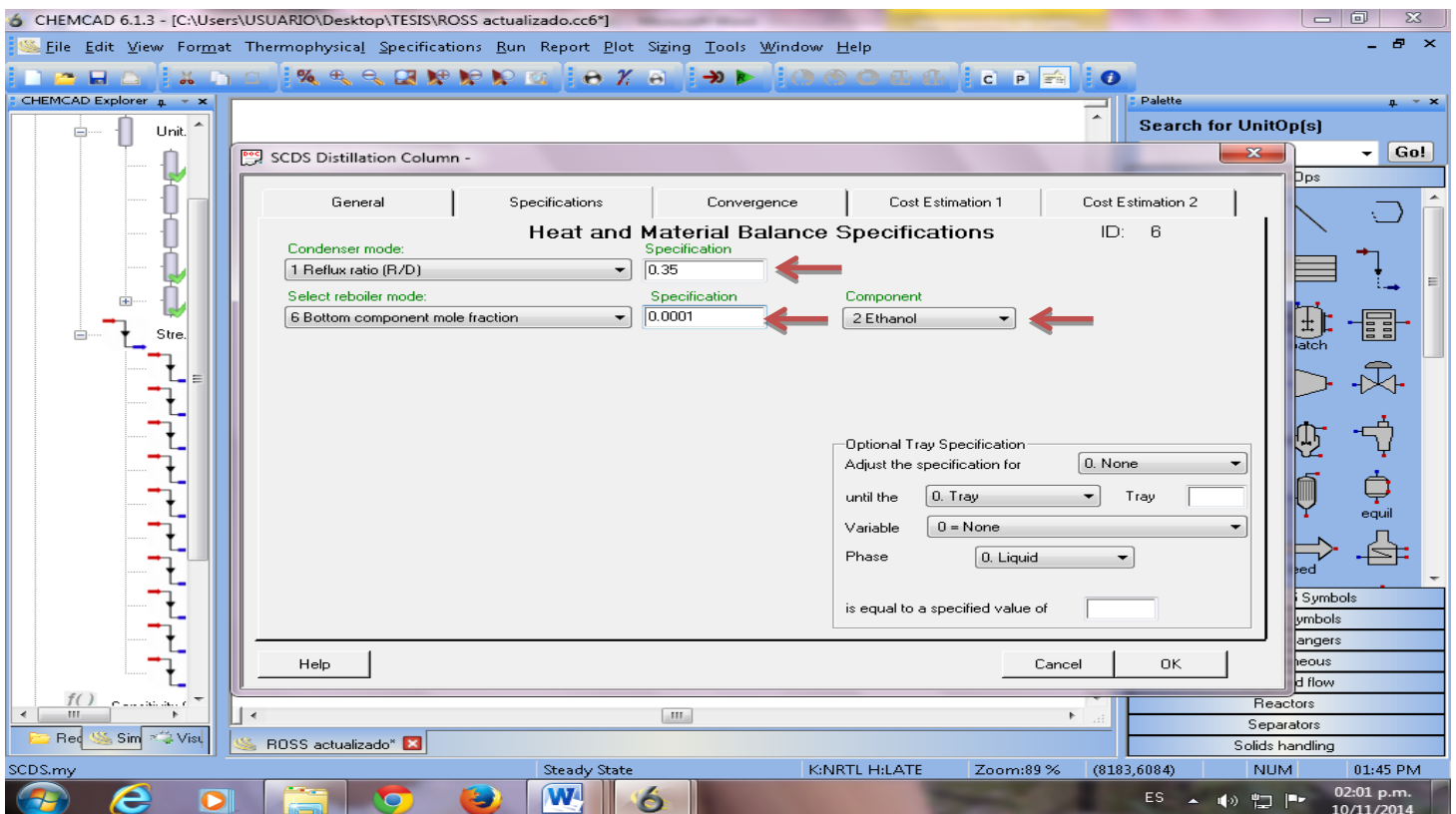


3.4. Columna de destilación extractiva. Ingresar los parámetros en la ventana general y especificaciones. Ver parámetros en página 69.

Ventana General

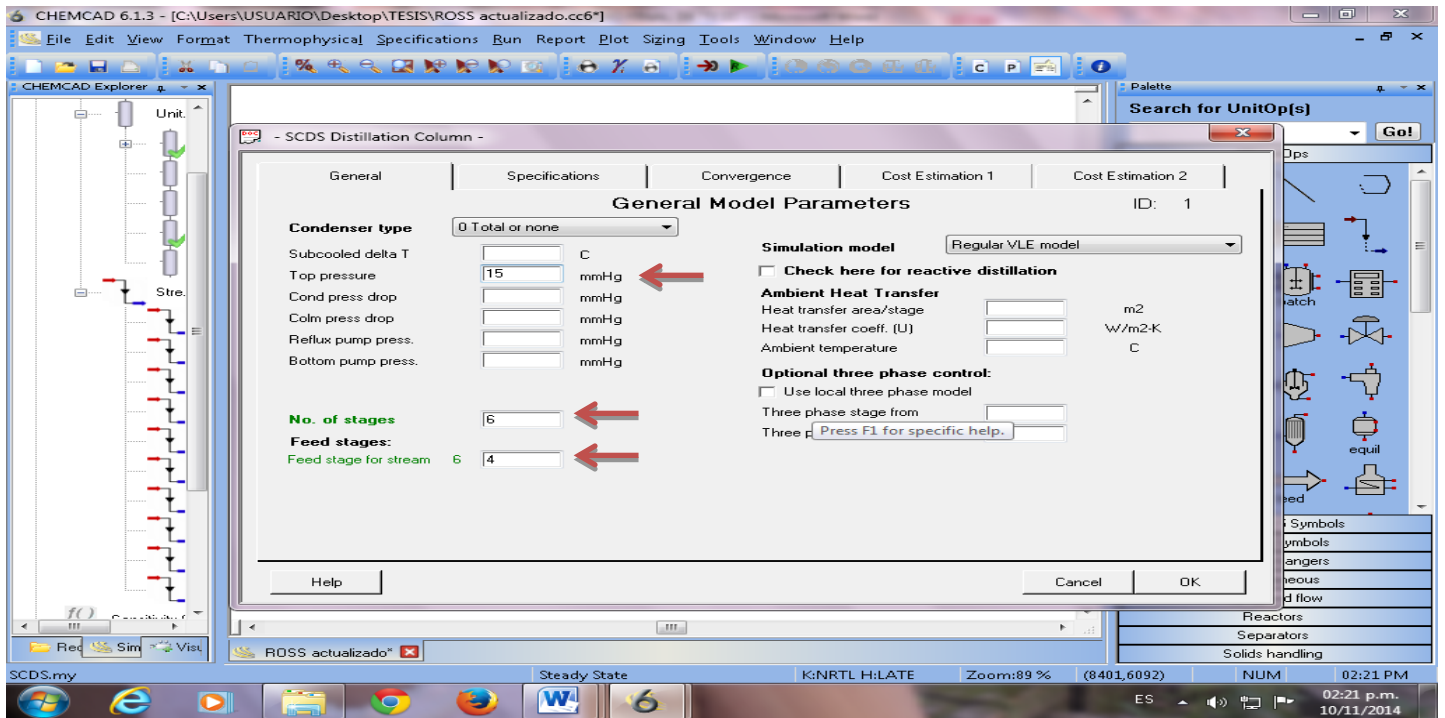


Ventana Especificaciones

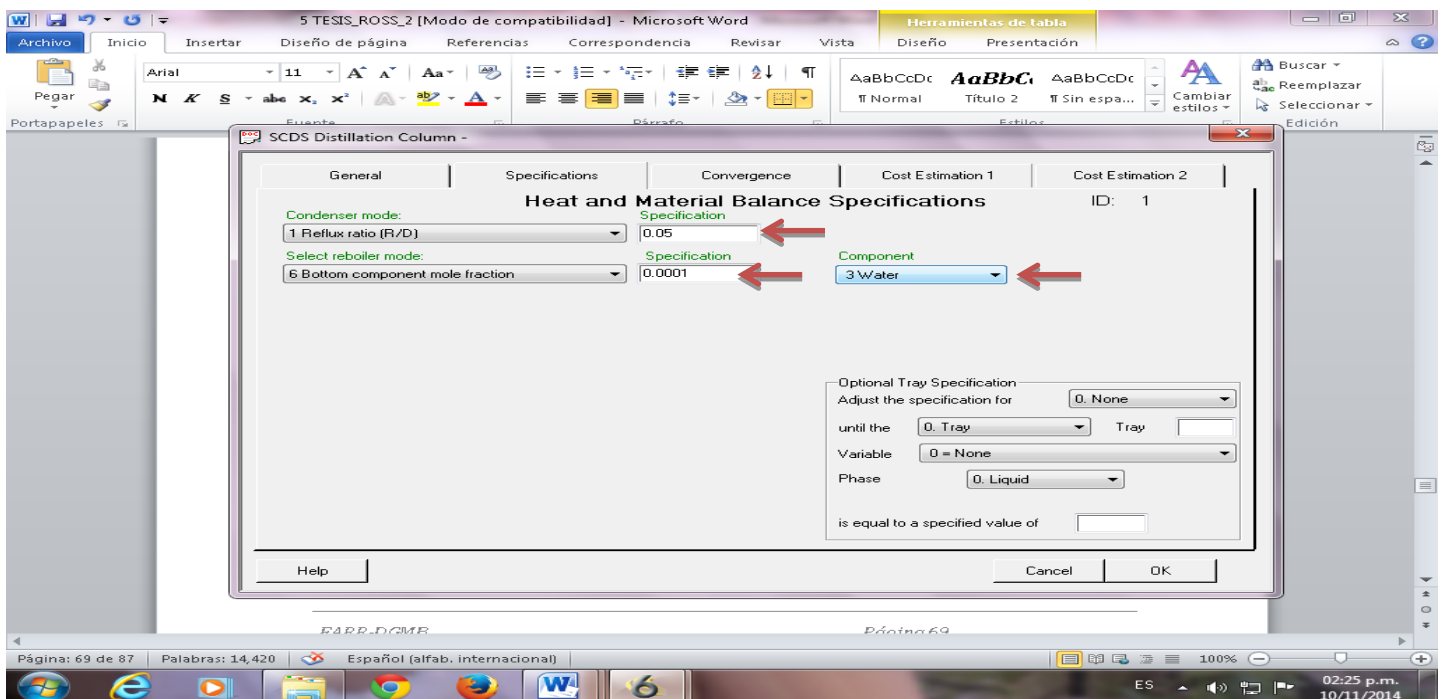


3.5. Columna de destilación recuperadora. Ingresar los parámetros en la ventana general y especificaciones. Ver parámetros en página 69.

Ventana General



Ventana Especificaciones



3.6. Hacer correr la toda la simulación haciendo click en Run All.

