



Separación de especies químicas del reformado de glicerol, empleando el software de simulación PRO II.

Freire Zapata, Daniela Salomé

Departamento de Ciencias de la Energía y Mecánica

Carrera de Petroquímica

Trabajo de Unidad de Integración Curricular, previo a la obtención del título de Petroquímica

Tuza Alvarado, Pablo Vinicio, D. Sc.

12 de abril del 2021



DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA
CARRERA DE PETROQUÍMICA

Certificación

Certifico que el trabajo de Unidad de Integración Curricular, **“Separación de especies químicas del reformado de glicerol, empleando el software de simulación PRO II”** fue realizado por la señorita **Freire Zapata, Daniela Salomé** el cual ha sido revisado y analizado en su totalidad por la herramienta de verificación de similitud de contenido; por lo tanto cumple con los requisitos legales, teóricos, científicos, técnicos y metodológicos establecidos por la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE, razón por la cual me permito acreditar y autorizar para que lo sustente públicamente.

Latacunga, abril del 2021

.....
Tuza Alvarado, Pablo Vinicio, D. Sc.

C. C.: 1104063241

Reporte de verificación



Urkund Analysis Result

Analysed Document:	Tesis_Salome_Freire.pdf (D101445198)
Submitted:	4/13/2021 8:29:00 AM
Submitted By:	pvtuza@espe.edu.ec
Significance:	0%

Sources included in the report:

Instances where selected sources appear:

.....
Tuza Alvarado, Pablo Vinicio, D. Sc.

DIRECTOR



DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA
CARRERA DE INGENIERÍA EN PETROQUÍMICA

Responsabilidad de autoría

Yo, **Freire Zapata, Daniela Salomé**, con cédula de ciudadanía n° 0550074710, declaro que el contenido, ideas y criterios del trabajo de Unidad de Integración Curricular: **“Separación de especies químicas del reformado de glicerol, empleando el software de simulación PRO II”** es de mi autoría y responsabilidad, cumpliendo con los requisitos legales, teóricos, científicos, técnicos, y metodológicos establecidos por la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE, respetando los derechos intelectuales de terceros y referenciando las citas bibliográficas.

Latacunga, abril del 2021

.....
Freire Zapata, Daniela Salomé

C.C.: 0550074710



DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA
CARRERA DE INGENIERÍA EN PETROQUÍMICA

Autorización de publicación

Yo **Freire Zapata, Daniela Salomé**, con cédula de ciudadanía n° 0550074710, autorizo a la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE publicar el trabajo de Unidad de Integración Curricular: **“Separación de especies químicas del reformado de glicerol, empleando el software de simulación PRO II”** en el Repositorio Institucional, cuyo contenido, ideas y criterios son de mi responsabilidad.

Latacunga, abril del 2021

.....
Freire Zapata, Daniela Salomé

C.C.: 0550074710

Dedicatoria

Cuando enfermaste, en el fondo de mi corazón lo único que pedía es que tuvieras fuerzas para estar conmigo en este día. Luchaste hasta el final y a pesar de todo, tu bendición y amor infinito siempre me acompañarán. Para ti Mamita Mela.

Agradecimientos

A mis padres, Juan y Cecilia, por ser ejemplo de trabajo, esfuerzo y lucha constante. Por brindarme su amor todos los días de mi vida y apoyarme, aunque no lo entiendan completamente. Gracias por enseñarme y siempre estar para mí si caigo.

A mi hermana, Viviana, por ser mi persona y quien mejor me entiende. Por ser ejemplo de que los sueños con trabajo y dedicación se hacen realidad. Por estar conmigo en la distancia y siempre alentarme a continuar.

A mi hermano, Juan Andrés, por ser mi compañero de travesuras hasta hoy, por brindarme su alegría a diario y motivarme a ser mejor cada día para saber guiarle y apoyarle siempre.

A mi novio, Raúl, por ayudarme y apoyarme en todos mis proyectos. Por su amor y paciencia. Por acompañarme en los momentos más hermosos y en los más difíciles de mi vida, por estar y ser parte mi vida y dejarme ser parte de la suya. De igual forma, a toda su familia por su amabilidad y cariño.

A la Ing. Mayra Salazar, Ing. Claudio Salcedo y Mihaela Hahne por la ayuda y soporte técnico en el manejo del software.

A mi tutor, Dr. Pablo Tuza, por su guía, enseñanza y conocimientos brindados durante mi carrera, en el desarrollo de prácticas pre – profesionales y durante el trabajo de titulación a pesar de las circunstancias adversas por las que atraviesa el mundo.

A toda mi familia, abuelitos, tíos y primos por siempre estar pendientes de mí, por estar juntos aun estando en diferentes lugares, porque el sueño de volver a estar todos juntos en casa me alienta a seguir adelante.

Infinitas gracias a todos.

Tabla de contenidos

Carátula.....	1
Certificación	2
Reporte de verificación.....	3
Responsabilidad de autoría.....	4
Autorización de publicación.....	5
Dedicatoria.....	6
Agradecimientos	7
Tabla de contenidos.....	8
Índice de tablas	11
Índice de figuras.....	14
Resumen	17
Abstract.....	18
Introducción	19
Antecedentes	19
Planteamiento del problema.....	21
Justificación e importancia	23
Objetivos	25
<i>Objetivo general</i>	25
<i>Objetivos específicos</i>	25
Hipótesis	25
Variables de la investigación	26
<i>Variable dependiente</i>	26
<i>Variable independiente</i>	26
Fundamentación teórica	27
Productos químicos básicos.....	27

Reformado de glicerol	28
Productos de reacción principales en fase líquida de APR de glicerol.....	29
<i>Glicerol</i>	29
<i>Ácido láctico</i>	30
<i>1,2 – propilenglicol</i>	32
<i>Acetol</i>	32
<i>Ciclopentanona</i>	32
<i>1,2 – butanodiol</i>	32
<i>2,5 – hexanodiona</i>	33
<i>4 – hidroxi – 3 – hexanona</i>	33
Separación de mezclas	33
Separación de mezclas en estado líquido	34
<i>Destilación Ordinaria</i>	34
<i>Stripping</i>	47
<i>Destilación mejorada</i>	47
<i>Extracción líquido – líquido</i>	48
<i>Adsorción</i>	49
<i>Cristalización</i>	49
Columna de destilación Petlyuk.....	49
Software de simulación PRO II.....	50
Metodología	53
Introducción.....	53
Extracción de datos.....	53
Separación del agua	54
Determinación de la Idealidad de la mezcla	54
Orden de Volatilidad Relativa	57
Velocidad marginal de vapor	59

Datos Columnas de Destilación.....	62
Tren de Separación.....	62
Optimización del plato de alimentación	67
Costos.....	69
<i>Columnas de destilación</i>	69
<i>Intercambiadores de calor</i>	76
<i>Bomba</i>	81
<i>Cristalizador</i>	84
Análisis y discusión de resultados	85
Concentraciones de Agua y Glicerol.....	85
Trenes de Separación	85
Primer sistema de separación	85
Segundo sistema de separación	92
<i>Separación de agua por cristalización</i>	92
<i>Idealidad de la mezcla</i>	94
<i>Volatilidad relativa</i>	96
<i>Secuencias de separación</i>	97
<i>Velocidad marginal de vapor</i>	98
<i>Datos columnas Shortcut</i>	99
<i>Secuencia de columnas Distillation</i>	100
<i>Optimización de la etapa de alimentación</i>	104
Costos de compra	106
Conclusiones y recomendaciones	111
Conclusiones.....	111
Recomendaciones.....	113
Bibliografía	114
Anexos	122

Índice de tablas

Tabla 1. <i>Número de secuencias posibles para la separación por destilación ordinaria .</i>	45
Tabla 2. <i>Datos de la reacción de reformado de glicerol.</i>	53
Tabla 3. <i>Secuencias de separación para cuatro productos.</i>	58
Tabla 4. <i>Secuencias de separación para 6 productos con 2 trazas.</i>	59
Tabla 5. <i>Separaciones clasificadas según los componentes clave.</i>	60
Tabla 6. <i>Tensión máxima permitida en función de la temperatura de diseño.</i>	70
Tabla 7. <i>Incrementos del espesor de placas de metal.</i>	73
Tabla 8. <i>Factores de materiales de construcción, F_M, para recipientes con presión.</i>	75
Tabla 9. <i>Factor de tipo de bandeja, F_{TT}.</i>	75
Tabla 10. <i>Factor de material para bandejas, F_{TM}.</i>	75
Tabla 11. <i>Parámetros para estimación de costos de intercambiadores de calor.</i>	77
Tabla 12. <i>Factores para materiales de construcción, F_M, para intercambiadores de calor de carcasa y tubos.</i>	79
Tabla 13. <i>Factor de corrección de la longitud del tubo, F_L, para intercambiadores de calor de carcasa y tubos.</i>	79
Tabla 14. <i>Tipos comunes de bombas centrífugas radiales y factores F_T.</i>	82
Tabla 15. <i>Factor de materiales de construcción, F_M, para bombas centrífugas.</i>	82
Tabla 16. <i>Factores F_T y rangos para motores eléctricos.</i>	84
Tabla 17. <i>Flujo molar por componente en la alimentación.</i>	86
Tabla 18. <i>Presencia de azeótropos en el primer sistema de separación.</i>	87

Tabla 19. <i>Volatilidad relativa en el primer sistema de separación.</i>	88
Tabla 20. <i>Resultados del primer sistema de separación.</i>	90
Tabla 21. <i>Resultados de la columna 2 del primer sistema de separación.</i>	91
Tabla 22. <i>Puntos de fusión de los componentes a separar.</i>	92
Tabla 23. <i>Resultados del Melter/ Freezer, la bomba y el calentador.</i>	94
Tabla 24. <i>Presencia de azeótropos entre especies químicas a ser separadas usando columnas de destilación en el segundo sistema de separación.</i>	95
Tabla 25. <i>Volatilidad relativa entre especies químicas a ser separadas usando columnas de destilación en el segundo sistema de separación.</i>	96
Tabla 26. <i>Resultados del análisis MVR.</i>	99
Tabla 27. <i>Resultados de las columnas Shortcut.</i>	100
Tabla 28. <i>Resultados de la columna de destilación 1 en el segundo sistema de separación.</i>	102
Tabla 29. <i>Resultados de la columna de destilación 2 en el segundo sistema de separación.</i>	102
Tabla 30. <i>Resultados de la columna de destilación 3 en el segundo sistema de separación.</i>	103
Tabla 31. <i>Datos del segundo tren de destilación.</i>	103
Tabla 32. <i>Comparación de resultados con y sin optimización del plato de alimentación.</i>	105
Tabla 33. <i>Resultados de los costos de las columnas de destilación.</i>	106
Tabla 34. <i>Resultados de los costos de los condensadores.</i>	107
Tabla 35. <i>Resultados de los costos de los hervidores.</i>	107

Tabla 36. <i>Resultados de los costos del calentador</i>	108
Tabla 37. <i>Resultados de los costos de la bomba.</i>	109
Tabla 38. <i>Resultados de los costos del cristalizador.</i>	110

Índice de figuras

Figura 1. <i>Clasificación de productos químicos básicos.</i>	27
Figura 2. <i>Mercado de glicerol.</i>	30
Figura 3. <i>Ácido láctico y derivados.</i>	31
Figura 4. <i>Proceso de separación.</i>	34
Figura 5. <i>Esquema de una columna de destilación típica.</i>	35
Figura 6. <i>Diagrama x-y para benceno / tolueno.</i>	36
Figura 7. <i>Equilibrio de fase de mezclas binarias.</i>	39
Figura 8. <i>Constitución de una columna de bandejas.</i>	41
Figura 9. <i>Detalles de la bandeja en una torre de bandejas.</i>	41
Figura 10. <i>Tipos de aberturas de bandeja para el paso del vapor al líquido.</i>	42
Figura 11. <i>Constitución de una columna empacada.</i>	43
Figura 12. <i>Materiales de empaques aleatorios.</i>	44
Figura 13. <i>Materiales de empaques estructurados.</i>	44
Figura 14. <i>Las cinco secuencias para cuatro componentes.</i>	46
Figura 15. <i>Esquema de una columna de destilación Petlyuk.</i>	50
Figura 16. <i>Concepto de enfoque modular secuencial.</i>	51
Figura 17. <i>Diagrama con corriente de reciclo.</i>	52
Figura 18. <i>Algoritmo para congelación del agua.</i>	55
Figura 19. <i>Definición de unidades de medida en PRO II.</i>	55
Figura 20. <i>Selección de componentes en PRO II.</i>	56

Figura 21. Selección del paquete termodinámico en PRO II.	56
Figura 22. Análisis binario VLE en PRO II.	57
Figura 23. Algoritmo para establecer la presión de la columna de destilación y el tipo de condensador.	60
Figura 24. Configuración de una columna Distillation en PRO II.	63
Figura 25. Interfaz de la columna Distillation.	63
Figura 26. Perfil de presiones de la columna Distillation.	64
Figura 27. Alimentación y productos de la columna Distillation.	64
Figura 28. Pestaña del condensador de la columna Distillation.	65
Figura 29. Ventana de especificaciones y variables de la columna Distillation.	66
Figura 30. Selección y colocación del número de platos para la columna Distillation.	66
Figura 31. Especificaciones para los platos de la columna Distillation.	67
Figura 32. Caso de estudio en PRO II.	68
Figura 33. Generación de resultados del caso de estudio.	68
Figura 34. Presión de vapor vs. Temperatura para el primer sistema de separación. ...	88
Figura 35. Diagrama de secuencia del primer sistema de separación.	89
Figura 36. Primer sistema de separación.	89
Figura 37. Simulación y especificación del Melter/ Freezer.	93
Figura 38. Etapa previa al segundo tren de separación.	94
Figura 39. Presión de vapor vs. Temperatura del segundo sistema de separación.	97
Figura 40. Secuencias de separación para los compuestos orgánicos.	98

Figura 41. <i>Segundo sistema de separación.</i>	101
Figura 42. <i>Optimización de la etapa de alimentación de la columna 1.</i>	104
Figura 43. <i>Optimización de la etapa de alimentación de la columna 2.</i>	104
Figura 44. <i>Optimización de la etapa de alimentación de la columna 3.</i>	105

Resumen

La separación de siete especies químicas procedentes de una solución líquida producto del reformado de glicerol en fase acuosa, que fueron agua, ciclopentanona, acetol, 1,2 – propilenglicol, 1,2 – butanodiol, ácido láctico y glicerol, se desarrolló mediante el diseño y simulación en computador de dos sistemas de separación en el software PRO II, los cuales se compararon según el costo. La mezcla resultó tener un grado elevado de idealidad. La destilación ordinaria es la principal operación unitaria que se emplea en los dos sistemas de separación porque la volatilidad relativa entre componentes clave resultó mayor a 1,05. Para hallar la secuencia más adecuada se aplicó un análisis de velocidad marginal de vapor cuyos resultados fueron favorables para la secuencia directa con valores iguales a 923,17 lbmol/h y 13,53 lbmol/h para el primer y segundo sistema, respectivamente. Los productos obtenidos después de la separación por destilación fueron agua con trazas de ciclopentanona, acetol, 1,2 -propilenglicol con trazas de 1,2 – butanodiol, ácido láctico y glicerol para el primer sistema de separación, mientras que para el segundo fueron trazas de ciclopentanona con acetol, 1,2 -propilenglicol con trazas de 1,2 – butanodiol, ácido láctico y glicerol. El primer sistema de separación empleó una secuencia de cuatro columnas de destilación con un costo de \$ 848942,82. El segundo sistema de separación constó de un equipo de cristalización por enfriamiento que separa el agua, una bomba que eleva la presión, un intercambiador de calor y tres columnas de destilación y su precio es igual a \$ 4739476,90. El análisis de costos demostró que es más económico emplear un tren de columnas de destilación en secuencia directa antes que separar el agua por cristalización con posterior separación mediante destilación. La diferencia del capital de inversión de la compra de equipos entre los dos sistemas de separación es igual al 82,09%.

Palabras clave:

- **GLICEROL**
- **DESTILACIÓN**
- **ÁCIDO LÁCTICO**
- **COSTOS**

Abstract

The separation of water, cyclopentanone, acetol, 1,2 – propylene glycol, 1,2 – butanediol, lactic acid, and glycerol from aqueous phase reforming of glycerol was carried out using two separation systems and the software PRO II, which were then compared with the respective cost. The first separation sequence was composed of four distillation columns, while the second was formed by a crystallizer, a bomb, a heat exchanger, and three distillation columns. The effluent from the reactor was a nearly ideal fluid mixture. Since the relative volatility between the chemical species was higher than 1,05, the ordinary distillation was used for the separation systems. The marginal vapor rate method was employed to find the separation sequence, with values equal to 923,17 lbmol/h and 13,53 lbmol/h for the first and second separation systems, respectively. Water with trace cyclopentanone, acetol, 1,2 – propylene glycol with trace 1,2 – butanediol, lactic acid, and glycerol was obtained from the column distillation composed separation system, while trace cyclopentanone with acetol, 1,2 – propylene glycol with trace 1,2 – butanediol, lactic acid, and glycerol were obtained from the crystallizer containing separation system. The cost was equal to \$ 848942,82 and 4739476,90 for the first and second separation systems, respectively. Since the capital cost difference between the two separations systems was equal to 82,09%, it is better to separate the chemical species using only distillation columns instead of utilizing a crystallizer to remove the water.

Keywords:

- **GLYCEROL**
- **DISTILLATION**
- **LACTIC ACID**
- **COSTS**

Capítulo I

Introducción

1.1 Antecedentes

En la actualidad la técnica de reformado de glicerol en fase acuosa (APR) es mayormente aplicada para la obtención de hidrógeno renovable. Sin embargo, como corriente de subproductos se hallan productos líquidos. Así, King et al. (2010) demostró que en la producción de hidrógeno empleando esta técnica, con condiciones de temperatura y presión iguales a 225 °C y 425 psig, respectivamente, con un catalizador Re-free 3% Pt/C los productos líquidos únicamente fueron etilenglicol y propilenglicol.

Por otro lado, Wawrzetz et al. (2010), en su estudio titulado "Towards understanding the bifunctional hydrodeoxygenation and aqueous phase reforming of glycerol" con el objetivo de analizar las reacciones acopladas al APR de glicerol emplearon catalizadores bifuncionales de Pt /Al₂O₃ a 498 K, 29 bar de presión total y una solución inicial de glicerol de 20% en masa y determinaron que los productos líquidos principales fueron 1,2-propanodiol, hidroxiacetona, 1,2-etanodiol, etanol y otros en concentraciones bajas.

Con el avance de la tecnología, hoy en día existen herramientas como simuladores de procesos químicos que permiten desarrollar el modelado, simulación y optimización de un proceso de destilación (Barrera et al., 2012).

En el trabajo de Castrellón et al. (2011) se desarrollaron tres casos de estudio para la simulación por computador de procesos de destilación empleando programas de simulación de la empresa Aspen Technology Inc. Así, en el caso 1 se diseñó una columna de destilación para una mezcla binaria ideal; el caso 2 trató el control de la columna del caso 1 implementado diferentes estructuras para ello y finalmente el caso 3 correspondió a la simulación de la destilación de una solución ternaria que forma azeótropos, es decir no es ideal, en estado estacionario. Todas las simulaciones se basaron en casos industriales reales y se realizaron exitosamente con el objeto de recalcar la importancia de una relación cercana que debe existir entre los programas informáticos de ingeniería y las personas involucradas en la ingeniería química.

Del mismo modo, Smejkal & Šoóš (2002) realizó la comparación entre los resultados obtenidos para un proceso de destilación reactiva en diferentes programas de simulación, por ejemplo para este estudio Aspen Plus y Hysys. Este trabajo tuvo como objetivo predecir cómo se comporta un reactor de esterificación y la columna de destilación reactiva para un sistema ácido acético - 1-butanol. Los datos experimentales y los de la simulación se analizaron por una parte y por otra los paquetes de estos programas de simulación se usaron en una planta piloto, y en ambos casos la concordancia fue satisfactoria. Sin embargo, como bien menciona el autor el precio de estos programas es un factor importante a considerar.

Por su lado Mejía (2012) emplea un software de simulación económico, PRO II, en su trabajo “Diseño de una columna de destilación a vacío para separar biodiesel (FAME's) con vistas a la producción de bioqueroseno para aviación” para desarrollar simulaciones de columnas de destilación para tres tipos distintos de ésteres metílicos de ácidos grasos (FAME). Tras realizar la simulación del modelado y dimensionamiento de las columnas se concluyó que los datos de destilación al vacío concuerdan con los datos experimentales en los tres casos.

Cuando la alimentación al proceso de destilación es una mezcla multicomponente, generalmente son requeridas más de una columna y según el número de productos requeridos las secuencias de separación posibles pueden variar y la selección de una secuencia óptima es un factor indispensable a considerar.

Las columnas de pared divisoria (DWC, por sus siglas en inglés) se usan en lugar de secuencias directas de destilación ya que pueden ahorrar energía y capital hasta en un 33% a comparación de trenes de columnas de destilación simple. Las DWC son un tipo de torre de destilación que en su interior tiene una pared vertical, lo que divide en dos secciones la carcasa de la columna y se puede separar tres o más componentes con ellas (Tututi et al., 2017).

En “Design of dividing wall columns for butanol recovery in a thermochemical biomass to butanol process” de Okoli & Adams II (2015), se aplica el método de velocidad marginal de vapor para hallar de forma rápida la secuencia de separación más prometedora, desde un punto de vista económico, es decir, aquella que tenga la tasa de vapor marginal más baja. Consecuentemente una vez determinada la secuencia óptima se diseñaron, modelaron y evaluaron configuraciones de torres de destilación de

pared divisoria. Los resultados de este estudio revelan que las configuraciones estudiadas son más económicas que una secuencia directa de tres columnas de destilación convencionales.

De forma similar, Yin & Liu (2019) en su trabajo “Automatic Identification of the Optimal Distillation Sequence Based on Its Integration with Reactor” propuso un método que permitió integrar un sistema de reacción a uno de separación con la finalidad de identificar de forma automática la mejor secuencia de destilación. Como resultado de la investigación se concluyó que para determinar el consumo energético de las secuencias de destilación las velocidades de vapor marginal mínimas son aplicables.

La estimación de costos de capital juega un papel crucial en la industria, pues como se revisó anteriormente diferentes configuraciones o el empleo de un equipo u otro puede representar el ahorro en el costo total anualizado. Shabani & Yekta (2006) con el objetivo de proporcionar una herramienta que permita seleccionar un método para la estimación de costos muestra como emplear los métodos: capacidad factorizada, equipo factorizado, modelo paramétrico, estimación de costos semidetallada y detallada, en diferentes etapas de diseño de un proyecto. El método de modelo paramétrico emplea en primer lugar un parámetro clave, mismo que está relacionado con el costo del equipo y por otro lado son necesarios factores que permitan calcular el costo total de un proceso o planta. El autor, en los resultados de este estudio menciona que la estimación de costos por modelo paramétrico es útil para empresas o ingenieros consultores e importante para determinar la continuidad o rechazo de un proyecto.

1.2 Planteamiento del problema

A nivel industrial en múltiples procesos la conversión obtenida en los reactores, mayormente, no alcanza el 100% por lo cual etapas posteriores de separación son requeridas en la industria química y petroquímica. Los sistemas de separación se aplican considerando que en la corriente de salida de los reactores con porcentajes menores de recuperación existirán reactivos sin reaccionar, productos deseados e incluso subproductos. Para diseñar una red de separación, en un inicio, se identifica la corriente con las especies a separar y se determina el grado de pureza requerida de los productos. Las separaciones pueden realizarse de forma directa, es decir, sin añadir un

agente externo como es el caso de la destilación. Sin embargo, existen otro tipo de operaciones de separación que sí requieren agentes extra para que las propiedades de la solución a separar se alteren de forma que la separación sea más sencilla, estas separaciones son conocidas como indirectas (Jiménez, 2003).

Un sistema de separación empieza con la selección del proceso adecuado que permita cumplir con el objeto de obtener especies químicas individuales en las corrientes de producto. Con la operación adecuada para la separación se realiza el diseño y posteriormente la optimización del proceso de separación. Para la selección de una operación unitaria idónea para la separación es necesario, antes de nada, estudiar las propiedades de la solución que desea separarse pues de estas depende la elección de un sistema de separación que proporcione los mejores resultados de recuperación de especies químicas (Jiménez, 2003).

Por otra parte, el aspecto económico también es importante y se debe considerar al momento de seleccionar y diseñar un sistema de separación. En procesos petroquímicos, alrededor de un 50% a un 90% del capital que se invierte corresponde al de equipos que se emplean para separaciones ya que muchas veces la separación es la fase principal de todo el proceso. Además, el costo de una sustancia altamente pura es justificado porque para fabricarla se necesitan procesos de separación (King, 2013).

El precio de venta de productos químicos puede ser de unos centavos o de muchos dólares por cada libra. En este sentido, nuevamente seleccionar el método de separación es crucial debido a que, si el precio de venta de un producto es bajo, los costes de la operación deberán reducirse empleando solventes baratos o requerimientos energéticos limitados de forma que todo el proceso sea rentable. Finalmente, la operación de separación que se seleccione no tiene que modificar el producto final, específicamente no tiene que operar en condiciones de temperatura o con agentes separadores de masa que pueden afectar la calidad del producto (Jiménez, 2003).

La destilación ordinaria es una técnica muy usada industrialmente debido a que su aplicación es relativamente sencilla y cuando los niveles de producción de una planta son altos, esta técnica ofrece resultados satisfactorios de separación de especies químicas. El presente trabajo busca diseñar sistemas de separación para la obtención de compuestos individuales con alto grado de recuperación a partir de una mezcla

proveniente de la corriente de productos líquidos del reformado de glicerol en fase acuosa, lo cual no se ha realizado con anterioridad. De esta forma se pretende mostrar que las propiedades físicas de las especies en solución juegan un rol importante en la primera etapa de selección del sistema de separación y cómo los costos de los equipos empleados en cada sistema pueden variar con la adición de etapas previas al tren de torres de destilación.

1.3 Justificación e importancia

La corriente de productos líquidos de un proceso de reformado de glicerol en fase acuosa si no se trata con un método de separación sería considerada simplemente como corriente de desecho pues el interés de este proceso está enfocado mayormente a los productos en fase gaseosa. Entre los productos líquidos más importantes están el glicerol (que no reaccionó), 1,2 – propilenglicol y ácido láctico. A partir de estas especies químicas, que como tal pueden ser empleadas directamente, tienen una característica importante que es que a partir de estas se pueden sintetizar otras especies de valor agregado.

El glicerol puede transformarse en 1,2 – propilenglicol y 1,3 – propanodiol por hidrogenólisis. El último de estos dioles es empleado en la obtención de fibras de poliéster ya que actúa como monómero en la polimerización con ácido tereftálico. La producción excesiva de glicerol, como subproducto en varios procesos, en la actualidad representa una ventaja para la industria del biodiesel por que puede transformarse en 1,2 – propilenglicol. Cabe mencionar que se estima que anualmente se demanda aproximadamente de 1,18 a 1,58 mil millones de toneladas de propilenglicol ya que este producto es usado típicamente en resinas de poliéster, fluidos anticongelantes, en la industria farmacéutica, cosmetológica, alimenticia y tabacalera, detergentes líquidos y pinturas (Pagliaro & Rossi, 2010).

Por halogenación del glicerol se puede sintetizar 1,3 – dicloro – 2 – propanol y a partir de este epiclorhidrina. La epiclorhidrina basa su importancia comercial en que se utiliza como agente que mantiene la linealidad de polímeros de éter (incluyendo resinas epoxi) obtenidos a partir de esta por condensación con polioles. La producción de esta sustancia es de al menos 903000 toneladas por año. Por su parte las resinas epoxi tienen muchas aplicaciones sobre todo en el ámbito de la protección y revestimiento de

otros materiales, es así como al usarse con otros agentes de curado llegan a producir alrededor de 3 millones de productos al año los cuales tienen un precio de más de 20000 millones de dólares. Otro de los productos químicos importantes que se obtienen a partir de glicerol es la acroleína, misma que puede polimerizarse para producir resinas acrílicas. La acroleína es además el eje fundamental para los polímeros superabsorbentes que se usan en productos de higiene infantil (Pagliaro & Rossi, 2010).

Con respecto a los productos más importantes que se obtienen a partir del ácido láctico se hallan principalmente el poli-ácido láctico (PLA), el ácido acrílico y los derivados de ambos. El ácido láctico puede producirse por síntesis química o por fermentación microbiana biotecnológica.

El mercado de ácido láctico se ha fortalecido y la demanda de producto ha crecido gradualmente, así en el año 2012 en Los Ángeles se produjeron 260000 toneladas y estudios estimaron que para el año 2020 la demanda sería de aproximadamente 600000 toneladas. Los costos operativos y de materias primas del proceso de fermentación para producir ácido láctico son elevados.

Por estas razones en la actualidad se buscan materiales baratos para la producción de ácido láctico que a su vez será aprovechado para transformarlo en PLA (Di Lorenzo & Androsch, 2018). El PLA se obtiene por polimerización directa del ácido láctico y se emplea como material biomédico en sistemas de administración y encapsulación de fármacos y en ingeniería de tejidos e hidrogeles debido a sus características de bioabsorción y biocompatibilidad (Jiménez et al., 2015).

El ácido acrílico se forma tras la deshidratación de ácido láctico y esta ruta de reacción es considerada como una forma de obtener plásticos y polímeros de acrilato (Wadley et al., 1997). Los polímeros que se obtienen a partir del ácido acrílico son aplicados para revestimiento de superficies, fibras sintéticas, adhesivos, etc. (Xiaobo et al., 2006).

En base a lo expuesto, es evidente la importancia de la separación de la mezcla de productos líquidos obtenidos en el reformado de glicerol en fase acuosa en especies individuales, sin embargo, no existen reportes en la literatura para tal fin. Por tanto, el propósito de este proyecto es diseñar un sistema de separación para estas especies químicas a través de la simulación por computador de forma que sean aprovechadas y

convertidas en productos de mayor valor comercial y además realizar la correspondiente evaluación económica del sistema de separación propuesto.

1.4 Objetivos

1.4.1 *Objetivo general*

Separar especies químicas del reformado de glicerol en fase acuosa, empleando el software de simulación Pro II y evaluar el costo del sistema de separación para que los compuestos individuales sean aprovechados y convertidos en productos de mayor valor comercial.

1.4.2 *Objetivos específicos*

Determinar del grado de idealidad de la mezcla de los productos de reacción de reformado de glicerol en fase líquida mediante análisis de presencia de azeótropos y del coeficiente de actividad en cada mezcla binaria posible.

Identificar la secuencia de separación óptima y económica a través de un análisis de velocidad marginal de vapor.

Diseñar un sistema de separación para obtener productos químicos por separado por simulación en computadora empleando el software Pro II.

Evaluar los costos de los equipos empleados en el sistema de separación mediante la aplicación de modelos de estimación de costos.

1.5 Hipótesis

¿Es posible diseñar y simular un sistema de separación de especies químicas del reformado de glicerol en fase acuosa, empleando el software de simulación Pro II?

1.6 Variables de la investigación

1.6.1 *Variable dependiente*

Costo total de los equipos empleados en el sistema de separación.

1.6.2 *Variable independiente*

Sistema de separación de especies químicas.

Capítulo II

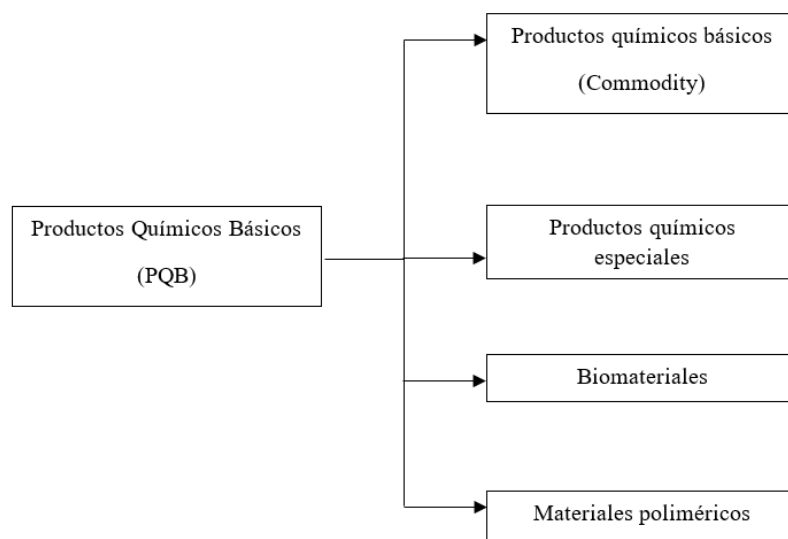
Fundamentación Teórica

2.1 Productos químicos básicos

Los productos químicos se clasifican en tres grupos: 1) productos químicos básico (PQB), 2) productos químicos industriales (PQI) y 3) productos específicos para el consumidor (PEC). Los productos químicos básicos se caracterizan porque son moléculas bien definidas o mezclas de moléculas que se fabrican usando como materia prima recursos naturales (Seider et al., 2009). La Figura 1 resume la clasificación de los productos químicos básicos.

Figura 1

Clasificación de productos químicos básicos.

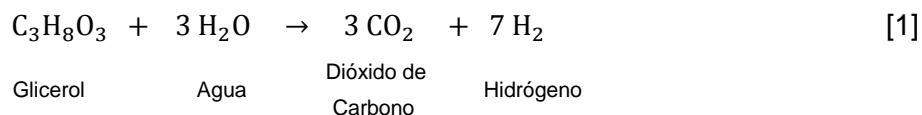


La importancia a nivel industrial de los PQB, específicamente de los commodities, radica en que son precursores de los PQI y PEC, en este sentido, los PQB se fabrican en grandes cantidades de miles de millones de libras por año a través de procesos a gran escala que funcionan continuamente (Seider et al., 2009). Productos químicos básicos de alto valor comercial como el ácido láctico, acetol, acetaldehído y

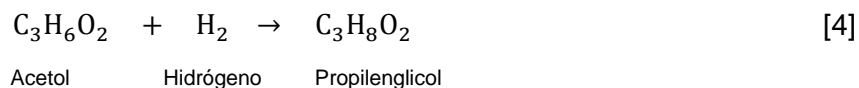
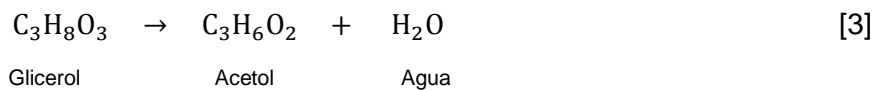
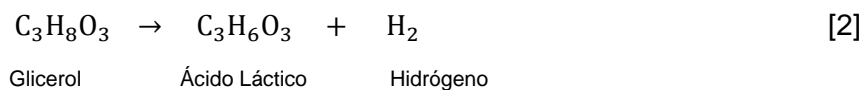
propilenglicol pueden obtenerse a partir del reformado en fase acuosa del glicerol, según lo reporta la literatura.

2.2 Reformado de glicerol

El proceso de reformado de glicerol en fase acuosa (APR), es ciertamente el mayor éxito que ha conseguido la nueva química del glicerol, desde el punto de vista industrial como el de la innovación (Pagliaro & Rossi, 2010).



Según, Tuza et al. (2013) el reformado de glicerol en fase acuosa produce principalmente H_2 y CO_2 , según la ecuación 1. Por otro lado, en este estudio los productos detectados en fase líquida a 270°C son: ácido láctico, acetol, propilenglicol y pequeñas trazas de 1,2 – butanodiol, ciclopentanona, 2,5 – hexanodiona y 4 – hidroxí – 3 – hexanona. Las reacciones para la obtención de cada especie se describen en las ecuaciones 2 – 4.



El ácido láctico y el acetol resultan de la deshidrogenación y la deshidratación del glicerol, respectivamente; mientras que el propilenglicol proviene de la hidrogenación de acetol (Tuza et al., 2013).

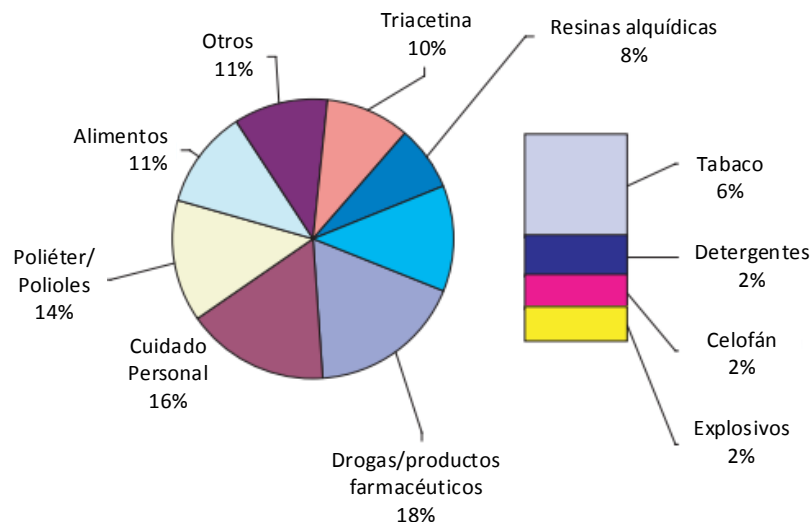
2.3 Productos de reacción principales en fase líquida de APR de glicerol

A continuación, se detallan aspectos relevantes y los usos que hacen de estas especies productos químicos fundamentales en la industria. El conocimiento de estos aspectos fundamenta el interés de obtener estos compuestos por separado.

2.3.1 Glicerol

El glicerol fue identificado por Carl W Scheele en 1779, y desde entonces se ha convertido en un producto químico muy valioso y versátil (Pagliaro & Rossi, 2010). Las plantas oleo químicas y de biodiesel son las principales fuentes de glicerol, ya que aquí se obtiene como subproducto de reacciones de saponificación e hidrólisis y en reacciones de transesterificación (Tan et al., 2013).

El glicerol, mayormente conocido como glicerina es un líquido viscoso, incoloro e inodoro, que cuando está totalmente anhidro y a presión atmosférica tiene puntos de fusión y ebullición normal iguales a 18,2 °C y 290 °C respectivamente. Este compuesto es completamente miscible en agua, tiene gran estabilidad física y química lo cual lo hace compatible con muchas otras sustancias químicas, no tóxico y ambientalmente amigable (Pagliaro, 2017). Esta sustancia química tiene múltiples usos en la industria, ya sea directamente, como aditivo o como materia prima. Según Kirk -Othmer (2007), el glicerol es ampliamente usado en medicamentos y productos para el cuidado bucal de forma individual. Además, se usa en la elaboración de tabaco y espumas de uretano y, en la actualidad su uso en alimentos y cosméticos es cada vez mayor. Así, el mercado del glicerol se resume en la Figura 2.

Figura 2*Mercado de glicerol.*

Nota. Recuperado de *The future of glycerol: new uses of a versatile raw material*, por Pagliaro y Rossi, 2010.

2.3.2 Ácido láctico

El ácido láctico se aisló del suero agrio de la leche por Carl Wilhelm Scheele en 1780. La molécula de ácido láctico o ácido 2-hidroxiopropanoico contiene dos grupos funcionales: un hidroxilo y un grupo ácido (Auras et al., 2010).

El ácido láctico además posee un átomo de carbono quiral, lo que le permite existir en dos formas enantioméricas. Entre las propiedades físico químicas más relevantes se encuentra que: 1) actúa como ácido en un medio acuoso; 2) reactividad bifuncional; y 3) actividad óptica en el carbono 2. Todas estas propiedades hacen del ácido láctico “un producto industrial importante que se utiliza como precursor de compuestos pequeños, como el propilenglicol, o grandes como polímeros acrílicos” (Castillo et al., 2013, p. 70).

En la actualidad el ácido láctico se produce principalmente mediante la fermentación de la glucosa. Sin embargo, se han empezado a desarrollar procesos de conversión termoquímica utilizando materias primas renovables para sintetizarlo ya que

la técnica de fermentación de glucosa presenta limitaciones en la eficiencia del proceso biológico y genera una gran cantidad de desechos (Wan et al., 2017).

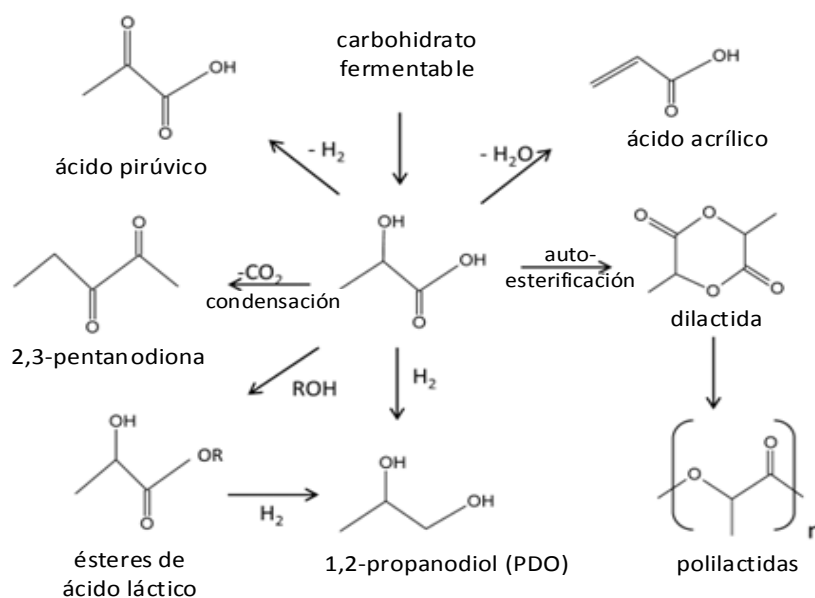
El ácido láctico es empleado ampliamente en la industria alimentaria, farmacéutica, cosmética y química. Acorde a Esposito & Antonietti (2013), “este compuesto representa una plataforma química importante para la generación de plásticos biodegradables y otros productos químicos básicos, incluido el lactato de etilo (un disolvente orgánico verde) o el 1,2-propanodiol”(p. 989).

Como se evidencia en la Figura 3, la importancia de este producto radica en que es un intermediario para producir lactatos de alquilo, propilenglicol, óxido de propileno, ácido acrílico y poli (ácido láctico) (Mäki-Arvela et al., 2014).

Del mismo modo, el ácido acrílico es considerado un producto químico valioso que se utiliza como materia prima para producir polímeros de acrilato (Aida et al., 2009).

Figura 3

Ácido láctico y derivados.



Nota. Recuperado de *Production of lactic acid/lactates from biomass and their catalytic transformations to commodities*, por Mäki-Arvela et al., 2014.

2.3.3 1,2 – propilenglicol

El monopropilenglicol, correctamente llamado 1,2 – propilenglicol por la IUPAC, es el miembro más importante de la familia de los glicoles ya que es el único que puede ser usado internamente de forma segura por humanos. Esta especie química se emplea en la fabricación de productos alimenticios, farmacéuticos, cosméticos y en aplicaciones en las que pueda ocurrir la absorción cutánea del producto (Kirk -Othmer, 2007).

2.3.4 Acetol

El acetol o hidroxiacetona ($\text{CH}_3\text{COCH}_2\text{OH}$) es un compuesto importante en la síntesis orgánica ya que a partir de este se pueden obtener dioles geminales, acetales y cetales (Apponi et al., 2006)

El acetol es ampliamente usado de forma directa en la industria farmacéutica y como aditivo en la industria alimenticia y cosmetológica. Además, es un intermediario en procesos de obtención de acroleína y compuestos heterocíclicos (Liu et al., 2019)

Actualmente el acetol es considerado como una molécula modelo del bioaceite ya que cuando este es producido por pirólisis rápida del bagazo de caña de azúcar, en su fracción soluble, el acetol es uno de los componentes principales (Vazquez & Moreira, 2019).

2.3.5 Ciclopentanona

El uso generalizado de la ciclopentanona ha conducido a los investigadores a estudiar todo tipo de procesos para su síntesis. A partir de la ciclopentanona se fabrican productos químicos de gran valor industrial y biológico, entre estos se destacan estabilizadores de poliolefinas y precursores de combustibles C15 y C17 y por otra parte se usa para preparar ingredientes de productos farmacéuticos, fungicidas y perfumes (Wang et al., 2018).

2.3.6 1,2 – butanodiol

El 1,2 – butanodiol es un líquido incoloro, completamente miscible en agua, soluble en alcoholes, poco soluble en éteres y ésteres e insoluble en hidrocarburos.

Entre los productos que se pueden formar a partir del 1,2-butanodiol están los acetales y cetales, cuando reacciona con ácidos o anhídridos dicarboxílicos y con diisocianatos se obtienen poliésteres y poliuretanos, respectivamente (Ullmann, 2011)

2.3.7 2,5 – hexanodiona

La 2,5 – hexanodiona es un derivado de la dicetona, a partir de la cual se pueden sintetizar alcoholes, aminas, disolventes, tensioactivos, ciclocetonas y en aplicaciones más actuales se emplean para preparar pirrolidina, un ingrediente farmacéutico (Ren et al., 2016). Por otro lado, existen estudios que afirman que la 2,5 – hexanodiona sirve como precursor de biocombustibles (Royslance & Choi, 2016).

2.3.8 4 – hidroxi – 3 – hexanona

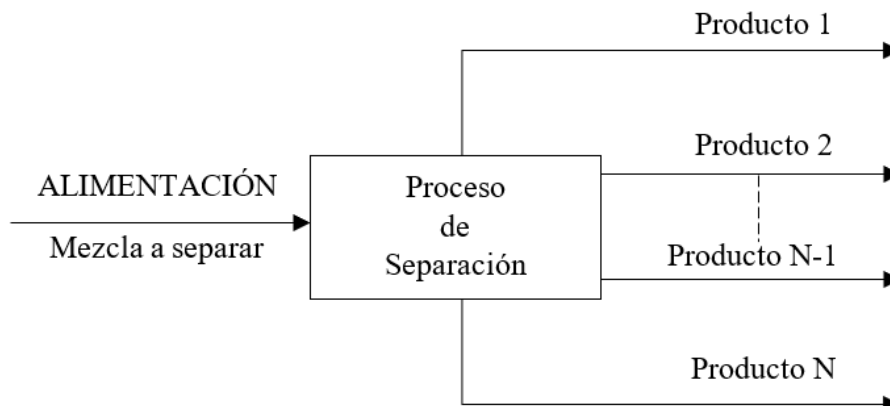
La 4 – hidroxi – 3 – hexanona pertenece a la familia de las hidroxicetonas, que a su vez son compuestos orgánicos volátiles, los cuales se usan en la medicina e industria farmacéutica. También se emplean en la producción de solventes de resinas, lacas, perfumes, aromatizantes, colorantes y plásticos (Dib et al., 2018). Así, específicamente la 4 – hidroxi – 3 – hexanona se usa como materia prima de aditivos alimenticios (Zhang et al., 2019).

2.4 Separación de mezclas

La creación de una mezcla de especies químicas a partir de estas de forma separada es un proceso que no requiere energía. Por lo contrario, el proceso inverso que requiere la separación de una mezcla en componentes puros, sí requiere energía. De forma general, en la Figura 4 se muestra un esquema de separación, donde un bloque produce la separación de especies y fases, mientras que las flechas señalan el movimiento de la alimentación y los productos. La alimentación y los productos pueden estar en fase vapor, líquido o sólido; pueden ocurrir más de una operación de separación; y los productos poseen diferente composición e incluso pueden encontrarse en diferente fase (Seader et al., 2010).

Figura 4

Proceso de separación.



Nota. Recuperado de *Separation process principles chemical and biochemical operations*, por Seader et al., 2010.

2.5 Separación de mezclas en estado líquido

Por heurística, Seider et al. (2009) señala que, para separar mezclas líquidas se emplean operaciones unitarias como: destilación ordinaria, stripping, destilación mejorada (extractiva, azeotrópica, reactiva), extracción líquido-líquido, cristalización y/o adsorción.

2.5.1 Destilación Ordinaria

En palabras de Luyben (2013), la destilación y los reactores químicos son la columna vertebral de lo que distingue a la ingeniería química de otras ramas de la ingeniería, por tal razón la destilación ocupa un lugar muy importante en la ingeniería química y la industria.

El fundamento principal de la destilación es el equilibrio líquido – vapor (VLE), es decir, para separar los componentes es indispensable “que la composición del vapor sea diferente a la del líquido con el que está en equilibrio en el punto de ebullición de este último” (Geankoplis, 1998, p. 716).

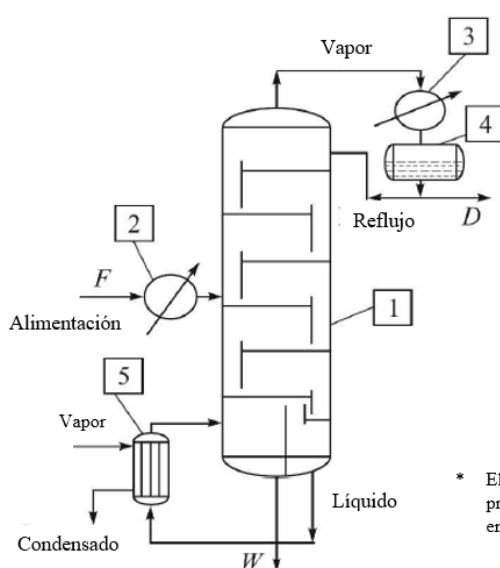
Un grado de separación mayor se logra con el contacto entre las fases vapor y líquido en múltiples etapas, las que se disponen en el interior de la columna (o torre) de destilación.

La columna, como la que se muestra en la Figura 5, consta esencialmente de una torre “que tiene bandejas o un empaque y partes internas adecuadas, un hervidor y un condensador” (Dutta, 2007, p. 319).

La alimentación ingresa en un punto adecuado de la columna. El hervidor vaporiza parcialmente el líquido del fondo. El vapor asciende a lo largo de la torre a través del relleno de esta, ya sean bandejas o un empaque determinado, y sale por la parte superior hacia el condensador. En este punto, parte del condensado se extrae como producto superior, llamado destilado, y el resto se retroalimenta como reflujo y fluye en forma descendente a lo largo de las bandejas o el empaque. Entonces, “se produce un contacto íntimo entre el líquido que fluye hacia abajo y el vapor que fluye hacia arriba en las bandejas o en la superficie de empaque”(Dutta, 2007, p. 319).

Figura 5

Esquema de una columna de destilación típica.



F: Alimentación (líquido, vapor o una mezcla de líquido y vapor)

D: Destilado o producto superior (es rico en los compuestos más volátiles)

W: Producto del fondo (es rico en las especies químicas menos volátiles)

1: La columna

2: Precalentador de la alimentación *

3: Condensador para el vapor de cabeza

4: Tambor de reflujo

5: Hervidor (para vaporización parcial del líquido del fondo)

* El producto caliente del fondo puede ser usado para precalentar la alimentación para la economía energética

Nota. Recuperado de *Principles of mass transfer and separation processes*, por Dutta, 2007.

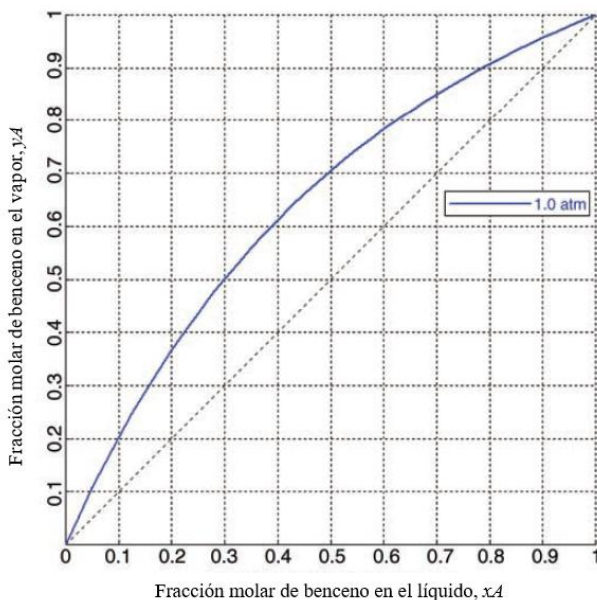
- **Volatilidad**

La destilación es una técnica que emplea la vaporización parcial y la condensación de una solución alimentada con el objetivo de separar los componentes más volátiles, extraídos por la zona superior de la torre, de los menos volátiles, productos del fondo (Dutta, 2007).

En un diagrama de equilibrio, como por ejemplo para una mezcla binaria de benceno (A) – tolueno (B) de la Figura 6, cuando la distancia entre la línea de equilibrio (curva azul sólida) y la línea de 45° (recta negra punteada) incrementa, simboliza mayor diferencia entre la composición del vapor y la composición del líquido, cuando esto ocurre se dice que la separación será más fácil de llevar a cabo (Geankoplis, 1998).

Figura 6

Diagrama x-y para benceno / tolueno.



Nota. Recuperado de *Distillation design and control using AspenTM simulation*, por Luyben, 2013.

La facilidad de la separación puede determinarse de manera cuantitativa considerando el parámetro de volatilidad relativa (α_{ij}). Geankoplis (1998), afirma que la volatilidad relativa se define como la relación entre la concentración de una especie i en el vapor y la concentración de i en el líquido, dividida entre la relación entre la

concentración de una especie j en el vapor y la concentración de j en el líquido, acorde a la ecuación 5.

$$\alpha_{ij} = \frac{\frac{y_i}{x_i}}{\frac{y_j}{x_j}} \quad [5]$$

Si la mezcla es ideal, la ecuación 5 puede reescribirse como una relación entre las presiones de vapor de i y j , como lo señala la ecuación 6. De otra forma, se deben agregar los coeficientes de actividad como en la ecuación 7.

$$\alpha_{ij} = \frac{P_i^s}{P_j^s} \quad [6]$$

$$\alpha_{ij} = \frac{\gamma_i P_i^s}{\gamma_j P_j^s} \quad [7]$$

De esta manera cuando las volatilidades relativas difieren significativamente de la unidad, específicamente más de 1,05, se anticipa una separación fácil y económica (Seider et al., 2009).

- **Idealidad de una mezcla**

Levine (2004) afirma que, una solución ideal es aquella en que las moléculas de uno de sus componentes pueden reemplazar a las de otro debido a que las diversas especies son muy similares entre sí, la sustitución de las moléculas entre componentes no causa ninguna variación en la estructura espacial de la solución o en la energía de las interacciones intermoleculares. Cabe recalcar, que la destilación ordinaria es aplicable únicamente cuando la alimentación son mezclas ideales y cuando la volatilidad relativa entre compuestos clave es mayor a 1,05.

En realidad, en la mayoría de los casos, las soluciones no exhiben un comportamiento ideal, es decir, presentan desviaciones, en mayor o menor grado, de la idealidad. En la Figura 7, se observa como el grado de no idealidad aumenta de a) a h).

Estas desviaciones pueden ser positivas o negativas. Para mayor comprensión de las desviaciones de la idealidad, es necesario entender la ley de Raoult, planteada en la ecuación 8.

$$P_A = P_A^S x_A \quad [8]$$

Donde

P_A : presión parcial del componente A

P_A^S : presión de vapor del componente A

x_A : fracción molar del componente A en la solución

En el caso de una mezcla binaria de i y j :

$$P_i = P_i^S x_i \quad [9]$$

$$P_j = (1 - x_i)P_j^S \quad [10]$$

Así la presión total de la mezcla será:

$$P = P_i + P_j = P_i^S x_i + (1 - x_i)P_j^S \quad [11]$$

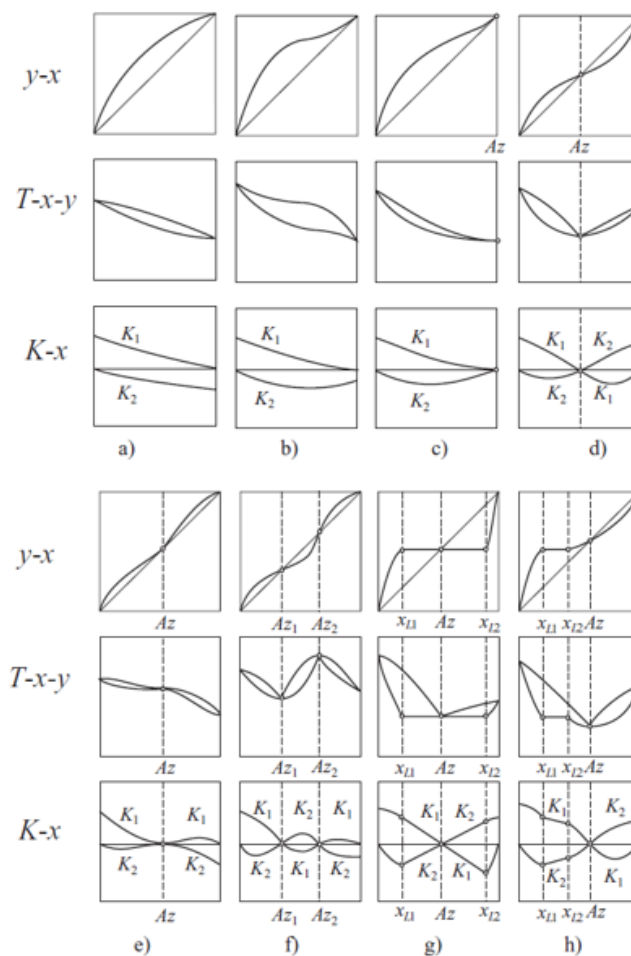
Cuando la presión de vapor total ejercida por una mezcla líquida resulta mayor a la que se calcula con la ecuación 11 la desviación se denomina “desviación positiva”. Si por el contrario la presión de vapor total es menor a la calculada con la ecuación 11 se exhibe una “desviación negativa de la idealidad”. Existen casos extremos en las desviaciones de la idealidad que producen azeótropos (Dutta, 2007).

Según Petlyuk (2004) “un azeótropo es una composición de mezcla binaria o multicomponente para la cual los valores de los coeficientes de equilibrio de fase para todos los componentes son iguales a uno” (p. 3).

Cuando estos aparecen, la separación de una mezcla en componentes puros se torna difícil y en ocasiones imposible de ejecutar mediante destilación ordinaria y es necesaria la aplicación de otras estrategias de separación, por ejemplo, la destilación azeotrópica (Petlyuk, 2004).

Figura 7

Equilibrio de fase de mezclas binarias.



Nota. a) mezcla ideal; (b) mezcla no ideal; (c) mezcla azeotrópica tangencial ($x_1, Az = 1$); (d) mezcla azeotrópica; (e) mezcla con azeótropo tangencial interno ($0 < x_1, Az < 1$); (f) mezcla con dos azeótropos Az_1 y Az_2 ; (g) mezcla heteroazeotrópica; y (h) mezcla azeotrópica con dos fases líquidas (diagramas $y - x$, $T - x - y$ y $K - x$). Az , punto azeotrópico o heteroazeotrópico; x_{L1} y x_{L2} , composiciones de fases líquidas.

Recuperado de *Distillation theory and its application to optimal design of separation units*, por Petlyuk, 2004.

- **Equipo de separación: la columna de destilación**

Para la industria de procesos químicos las torres de destilación son importantes, en consecuencia, su diseño y operación correcta son cruciales. Sin duda alguna, la pieza más importante de la columna muy posiblemente es las partes internas ya que una vez puesto en marcha el proceso su acceso a ellas es difícil. Ahora bien, si los componentes de la torre no funcionan de manera adecuada, toda la torre operará deficientemente y todo el proceso químico se verá afectado (Pilling & Holden, 2009).

Seleccionar los componentes internos de una columna, según Pilling & Holden (2009), debe basarse en tres aspectos principales:

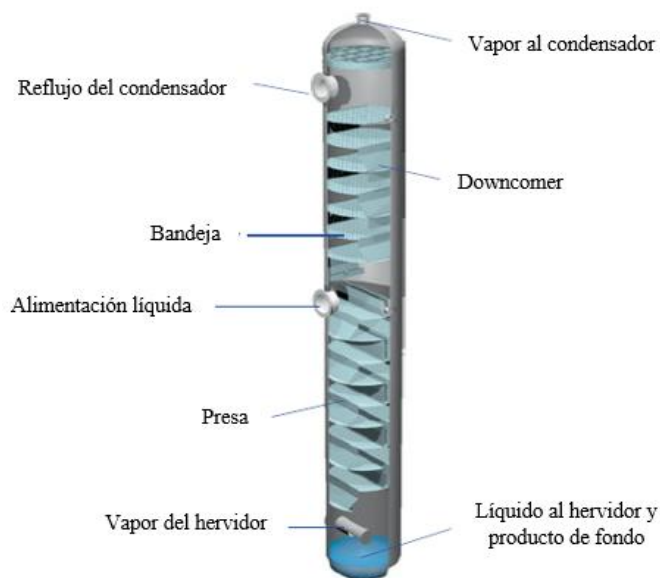
1. El propósito de la separación.
2. Rango requerido de flujo de vapor y líquido
3. Propiedades físicas del vapor y el líquido en toda la torre.

Los componentes internos de una columna de destilación pueden ser bandejas, empaques al azar o empaques estructurados. De forma general las columnas de bandejas, también llamadas de platos, de 3 ft o más de diámetro se usan en instalaciones iniciales. Mientras que, las columnas empaquetadas se prefieren cuando la operación se lleva a cabo en condiciones de bajo vacío o la caída de presión es baja. Además, se debe considerar que la mayoría de las torres no superan los 200 ft por razones estructurales (Seider et al., 2009).

Las torres de bandejas, como la de la Figura 8, son recipientes a presión dispuestos en forma vertical y cilíndricos, donde el contacto íntimo entre el vapor y el líquido se da a través de bandejas o platos que aceleran la transferencia de masa (Seader et al., 2010).

Figura 8

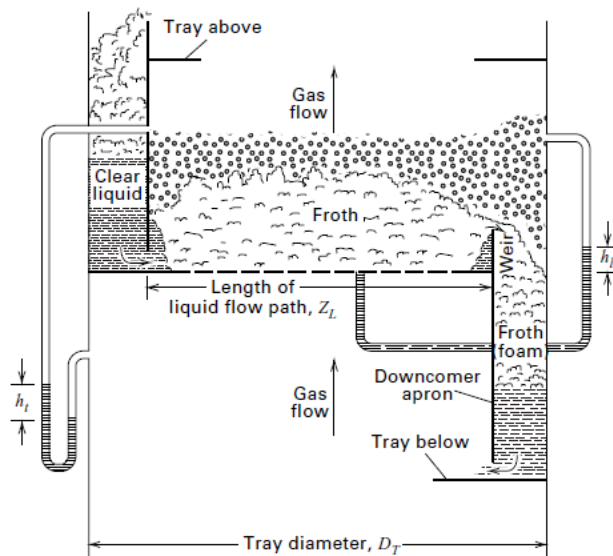
Constitución de una columna de bandejas.



Nota. Recuperado de *Process engineering*, por Kleiber, 2020.

Figura 9

Detalles de la bandeja en una torre de bandejas.

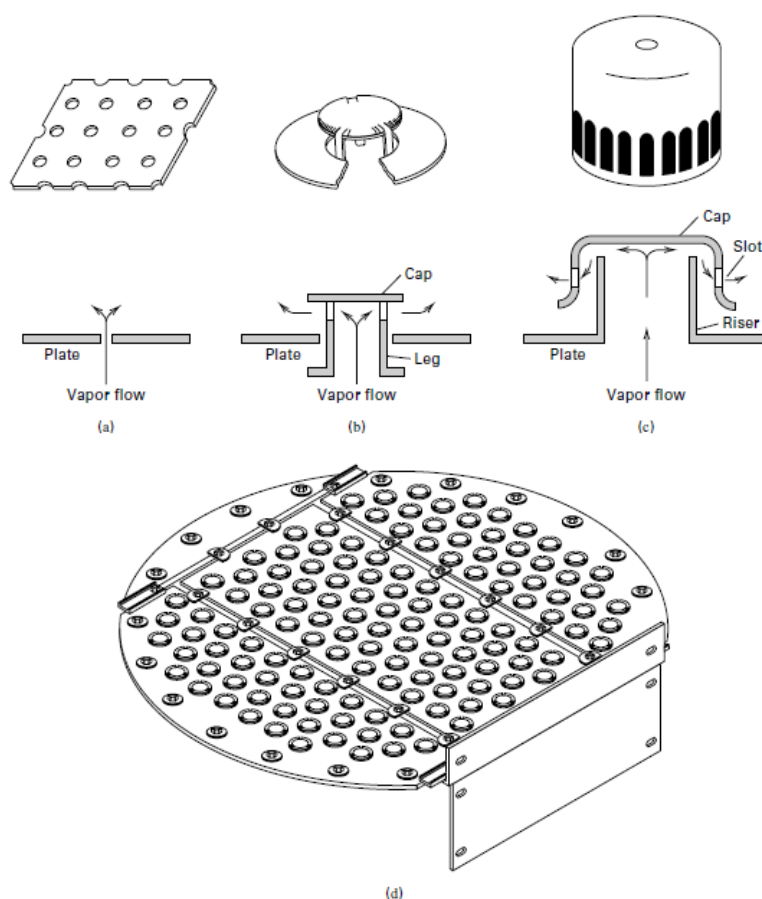


Nota. Recuperado de *Separation process principles chemical and biochemical operations*, por Seader et al., 2010.

En la Figura 9, se observa una visión a detalle de una bandeja en la torre. El funcionamiento de este tipo de torres se caracteriza porque un vertedero acumula el líquido proveniente de la bandeja superior. Por encima del vertedero el líquido que sale de la bandeja entra en el downcomer y cae a la bandeja inferior. El vapor sube a través de aberturas propias de cada tipo de bandeja. El vapor se divide en pequeñas burbujas con una gran área de transferencia de masa y se distribuye en el líquido cuando estos entran en contacto. Los tipos de bandejas más usados son el tamiz (o platos perforados), la válvula y el tapón de burbuja, como se muestra en la Figura 10 (Kleiber, 2020).

Figura 10

Tipos de aberturas de bandeja para el paso del vapor al líquido.



Nota. (a) perforación; (b) tapa de válvula; (c) tapón de burbuja; (d) bandeja con tapas de válvulas. Recuperado de *Separation process principles chemical and biochemical operations*, por Seader et al., 2010.

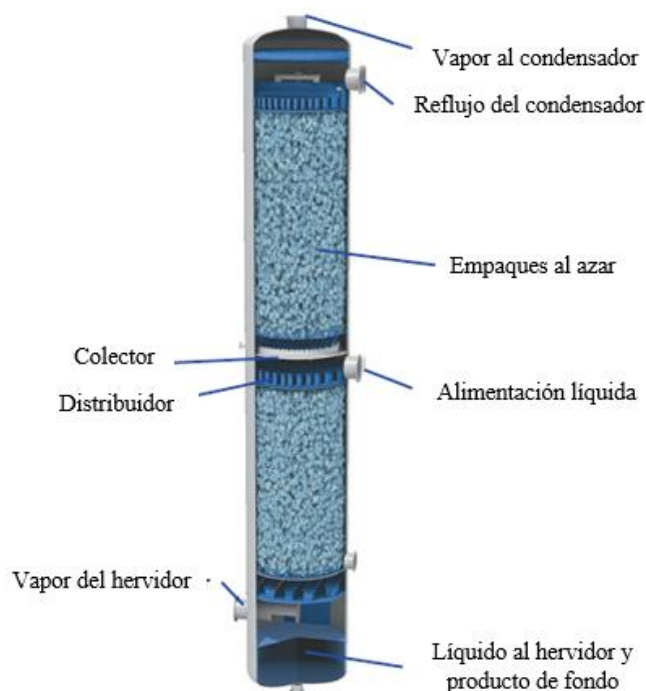
Por su parte las columnas empacadas son recipientes que contienen un relleno distribuido en una o más secciones, también llamadas lechos (Seader et al., 2010).

En estas columnas, el volumen del empaque distribuye el líquido que baja a través el empaque creando un área de transferencia de masa grande entre el líquido y el vapor. Entre los lechos, el líquido se recoge y redistribuye usando una unidad colectora / distribuidora. Esta acción es sumamente necesaria ya que el líquido tiende a fluir dentro del empaque y concentrarse cerca de la pared de la columna (Kleiber, 2020).

La Figura 11 muestra una columna empacada. Las torres empacadas pueden estar rellenas de empaques aleatorios, algunos de los cuales se muestran en la Figura 12, o de empaques estructurados (u ordenados) algunos mostrados en la Figura 13.

Figura 11

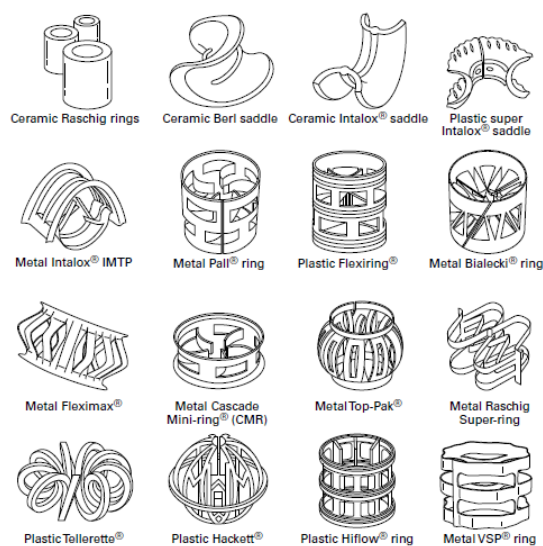
Constitución de una columna empacada.



Nota. Recuperado de *Process engineering*, por Kleiber, 2020.

Figura 12

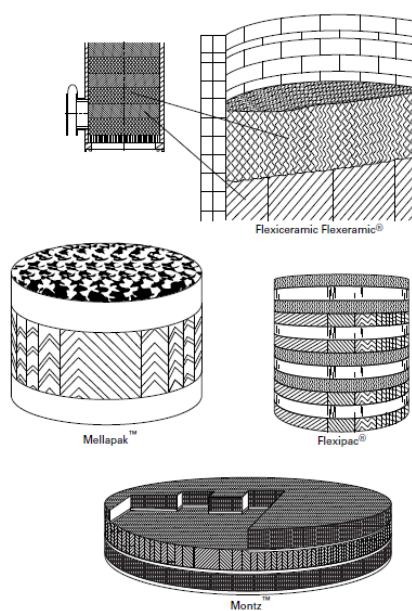
Materiales de empaques aleatorios.



Nota. Recuperado de *Separation process principles chemical and biochemical operations*, por Seader et al., 2010.

Figura 13

Materiales de empaques estructurados.



Nota. Recuperado de *Separation process principles chemical and biochemical operations*, por Seader et al., 2010.

- **Velocidad marginal de vapor**

En destilación ordinaria, generalmente se considera que una única corriente de alimentación se enviará a cada columna y se obtendrán dos productos, el destilado y los fondos. En el caso de una alimentación multicomponente que se desea separar en productos finales P puros y/o mezclas de componentes, se puede establecer el número de secuencias de columnas de destilación ordinarias diferentes, N_s , para producir un número de productos P usando la ecuación 12 (Seider et al., 2009).

$$N_s = \sum_{j=1}^{P-1} N_j N_{P-j} = \frac{[2(P-1)]!}{P!(P-1)!} \quad [12]$$

La Tabla 1 muestra resultados de la aplicación de la ecuación 12 para secuencias que producen hasta 10 productos.

Tabla 1

Número de secuencias posibles para la separación por destilación ordinaria.

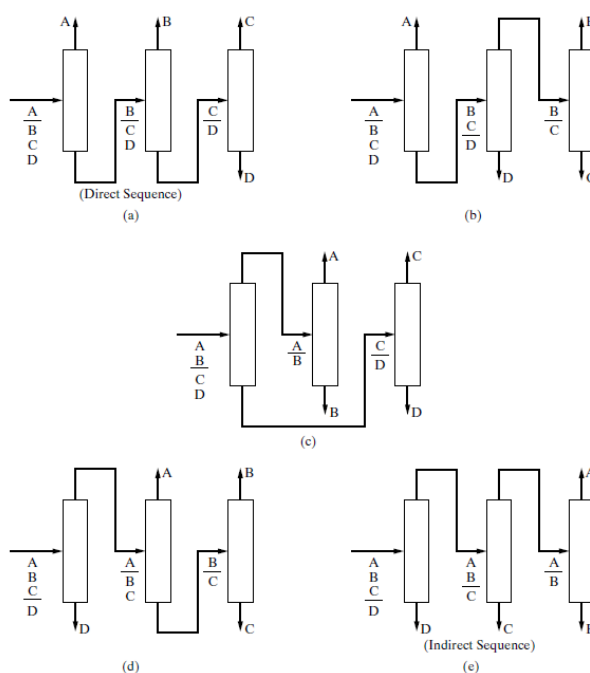
Número de Productos, P	Número de Separadores en la Secuencia	Número de Secuencias Diferentes, N_s
2	1	1
3	2	2
4	3	5
5	4	14
6	5	42
7	6	132
8	7	429
9	8	1430
10	9	4862

Nota. Recuperado de *Product and process design principles Synthesis, Analysis, and Evaluation*, por Seider et al., 2009.

Como ejemplo, en la Figura 14, se pueden ver las 5 secuencias diferentes para separar 4 productos con 3 separadores en cada secuencia.

Figura 14

Las cinco secuencias para cuatro componentes.



Nota. Recuperado de *Product and process design principles Synthesis, Analysis, and Evaluation*, por Seider et al., 2009.

Cuando la selección de la secuencia de columnas de destilación es incierta, es recomendado emplear métodos para determinar la secuencia óptima que se basen en el diseño de la columna y/o en la estimación de costos. Uno de los métodos más conocidos, se denomina Velocidad Marginal de Vapor (MVR, por sus siglas en inglés) y es famoso debido a que puede aplicarse sin la necesidad de calcular los costos de las columnas o realizar su diseño por completo (Seider et al., 2009).

El método MVR es descrito por Modi & Westerberg (1992), quienes señalan que el costo marginal anualizado (MAC, por sus siglas en inglés) es la diferencia de costos entre la separación en ausencia y en presencia de componentes no clave mientras que el MVR es la diferencia en la tasa de vapor molar que pasa por la torre. Por tanto, afirman que una aproximación del MAC es el MVR y, en consecuencia, la secuencia con la suma mínima MVR será la agrupación de columnas óptima.

2.5.2 Stripping

El stripping es utilizado en las industrias para separar y recuperar los componentes de la mezcla líquida o purificar una solución de modo que cumpla con ciertas especificaciones o estándares. En esta operación, se emplean torres cilíndricas conocidas como separadores, en los cuales ingresa una solución líquida y entra en contacto con un gas adecuado que extraerá uno o más componentes de la fase líquida (Albright, 2009).

2.5.3 Destilación mejorada

Las separaciones por destilación ordinaria no siempre pueden llevarse a cabo ya que resulta difícil o impráctica considerando algunas condiciones como la inestabilidad térmica o equilibrios de fase líquido – vapor desfavorables. En estos casos se recurre a técnicas de separación mejorada como las destilaciones extractiva, azeotrópica y reactiva (Couper et al., 2012).

- **Destilación extractiva**

La destilación extractiva es una técnica ampliamente usada en la industria y en estos días, para la ingeniería petroquímica es un método de separación importante. En esta técnica, se requiere la adición de un solvente para que altere la volatilidad relativa de los componentes y en consecuencia obtener un producto puro en el destilado y otro, en el fondo. El producto del fondo saldrá acompañado del solvente, el cual puede separarse y ser recuperado fácilmente en otra columna (Lei et al., 2005)

- **Destilación reactiva**

Cuando la separación y la reacción ocurren en el mismo recipiente se refiere a un proceso de destilación reactiva. Para que la destilación reactiva sea aplicable, los productos deben ser más ligeros y / o más pesados que los reactivos. Por ejemplo, considerando una reacción química, en la que los reactivos A y B producen C y D, el orden de las volatilidades relativas, para un caso ideal, sería descrito por la ecuación 14. Así, uno de los productos (C) es el más liviano y el otro (D) es el más pesado, mientras que los reactivos son especies con volatilidades intermedias (Luyben, 2013).



$$\alpha_C > \alpha_A > \alpha_B > \alpha_D \quad [14]$$

Hay que señalar que la combinación de la destilación y la reacción es posible únicamente cuando las condiciones de ambas operaciones son combinables. Es decir, la presión y la temperatura de la reacción es similar con la de la operación de separación, para un valor de conversión determinado. Además, el tipo de catálisis juega un rol importante en este caso. La catálisis homogénea es mayormente posible, pero necesita el reciclaje del catalizador en un paso adicional de separación. En la catálisis heterogénea en cambio es necesario añadir construcciones especiales en el recipiente para que se pueda fijar el catalizador en la zona de reacción (Sundmacher & Kienle, 2006).

- **Destilación azeotrópica**

La destilación azeotrópica tiene como objetivo la separación o concentración por encima del punto azeotrópico de la mezcla usando un arrastrador (Couper et al., 2012).

Como se ha mencionado, la destilación azeotrópica se consigue al agregar a la fase líquida, un componente volátil extra. Este componente cambiará la volatilidad relativa de uno de los componentes en mayor medida que del otro, para que la destilación pueda efectuarse. Según Lei et al. (2005), los componentes a separar por esta técnica, usualmente son especies químicas con puntos de ebullición cercanos, que pueden o no formar azeótropos. Pero, si bien es cierto, a veces los componentes forman azeótropos y sus puntos de ebullición están alejados.

2.5.4 Extracción líquido – líquido

La extracción líquido – líquido o extracción con solventes implica la separación de una mezcla líquida por contacto íntimo con otro líquido insoluble. Según Treybal (2000), el grado de separación se garantiza si los componentes de una solución se distribuyen de forma diferente en los dos líquidos. Para incrementar el grado de separación se requiere que dicha operación, es decir, el contacto entre los líquidos se lleve a cabo en múltiples etapas.

2.5.5 Adsorción

La adsorción es una operación empleada para eliminar o separar componentes de un líquido o un gas que tienen afinidad por un sólido. Este proceso es posible debido a la tendencia del soluto de interés, conocido como adsorbato, a acumularse en la superficie de un sólido, el cual se denomina adsorbente (Gabelman, 2017).

2.5.6 Cristalización

La cristalización es una técnica que involucra la separación de un producto cristalino a partir de una solución (Myerson et al., 2019).

Seider et al. (2009) indica que la mayor parte de las operaciones de cristalización industrial son cristalización en solución. Sin embargo, actualmente, las aplicaciones de la cristalización en estado fundido están creciendo.

Para soluciones en las que la solubilidad es una función importante de la temperatura es común usar cristalización por enfriamiento. Cuando la solubilidad es suficientemente baja se logra el grado de cristalización deseado (Tung et al., 2009).

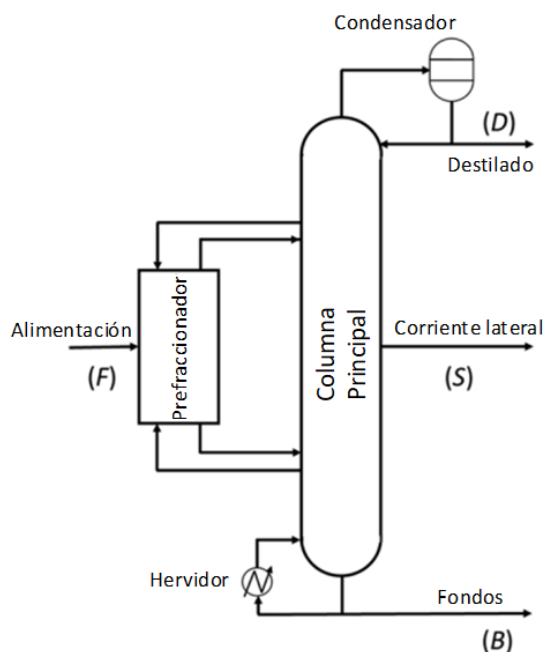
Por otro lado, la cristalización en solución cristaliza compuestos inorgánicos procedentes de soluciones acuosas. Por otra parte, la cristalización en estado fundido está compuesta por dos o más componentes orgánicos cuyos puntos de congelación no están muy alejados entre sí (Seider et al., 2009).

2.6 Columna de destilación Petlyuk

La industria química y petroquímica consumen alrededor del 34% de la energía de fabricación total en Estados Unidos, de este porcentaje, el 57% corresponde a las operaciones de destilación. Sin embargo, la eficiencia termodinámica de la destilación es a penas del 10%. Por estas razones, actualmente se emplean tecnologías mejoradas de destilación, entre estas las más desarrolladas son las columnas de destilación de acoplamiento térmico (TCDC, por sus siglas en inglés), mismas que se emplean para separar mezclas multicomponente. Las configuraciones más representativas de las TCDC son las columnas de destilación Petlyuk (PDC) y las columnas de pared divisoria (DWC) (Carranza & González, 2020).

Figura 15

Esquema de una columna de destilación Petlyuk.



Nota. Recuperado de *A Petlyuk distillation column dynamic analysis: Hysteresis and bifurcations*, por Carranza y González, 2020.

Las PDC se diferencian de las DWC, en el número de carcasa en su configuración. Como se revisó anteriormente en la DWC existe una pared dentro de la carcasa de la columna la cual la divide en dos secciones, mientras que en una PDC cada columna (prefraccionador y columna principal) tiene una carcasa individual como se observa en la Figura 15 (Carranza & González, 2020).

En otras palabras, el sistema de separación Petlyuk combina el hervidor y condensador en el prefraccionador con la columna principal, permitiendo ahorros significativos en los costos de capital (Biyanto et al., 2017).

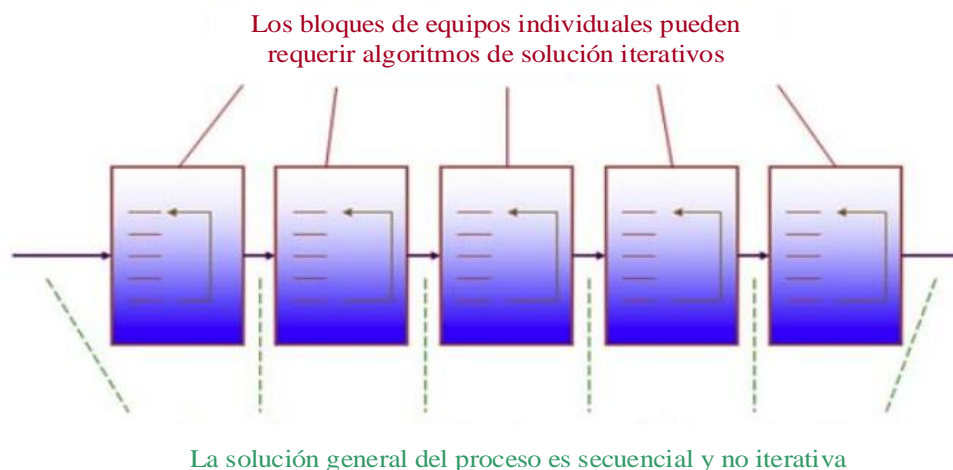
2.7 Software de simulación PRO II

“El software de simulación de procesos Pro II es un simulador de estado estable que permite mejorar el diseño de procesos y el análisis operativo” (Dimian et al., 2014, p. 68)

Este software permite realizar balances de materia y energía con cálculos rigurosos para gran variedad de procesos químicos y ofrece una base de datos amplia de modelos termodinámicos para la simulación de prácticamente cualquier proceso industrial (Ponce & Hernández, 2019).

Figura 16

Concepto de enfoque modular secuencial.

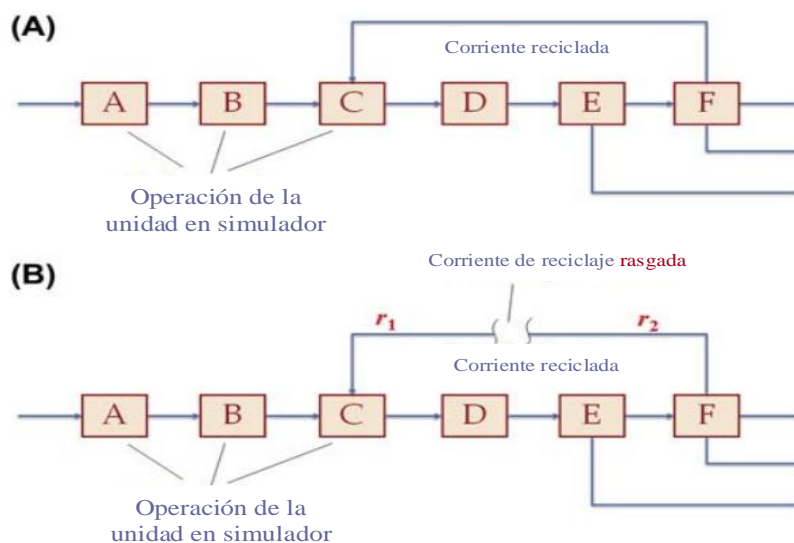


Nota. Recuperado de *Chemical engineering process simulation*, por Foo et al., 2017.

PRO II emplea principalmente el enfoque modular secuencial (SM) para la resolución de modelos de simulación. El SM requiere inicialmente de los datos del flujo de alimentación y las especificaciones de la unidad de proceso. Como se muestra en la Figura 16, cada bloque contiene algoritmos para resolver de forma conjunta el modelo de proceso en el diagrama de flujo. Cuando un bloque resuelve la convergencia genera resultados para las corrientes de salida, mismos que serán empleados como datos de entrada del siguiente bloque. Este último bloque, de igual forma, tiene que resolver la convergencia. El proceso se repite y termina cuando todos los bloques del proceso se resuelven y convergen. Cabe mencionar que existen bloques unitarios que requieren de iteraciones para alcanzar la convergencia, pero el proceso global no las requiere ya que es un proceso secuencial (Foo et al., 2017).

Figura 17

Diagrama con corriente de reciclo.



Nota. (A) Un proceso que consta de una corriente de reciclaje; (B) concepto de corriente de reciclaje rasgada. Recuperado de *Chemical engineering process simulation*, por Foo et al., 2017.

Si en el diagrama de flujo de proceso existen corrientes de reciclo el enfoque SM aplica la estrategia conocida como “tear recycle stream” (corriente de reciclaje rasgada) para que los bloques involucrados alcancen la convergencia. Por ejemplo, en la Figura 17 los bloques se resolverán y convergerán en orden sin mayor inconveniente desde A hasta B. Entre los bloques C y F existe una corriente de reciclo por lo que para la solución de ambos bloques se requieren iteraciones. Entonces, el bloque C solo se resolverá cuando la corriente de reciclaje contenga las propiedades necesarias, es decir cuando el bloque F converja y este último sólo se puede simular tras la primera convergencia de C (Foo et al., 2017).

Con este software de simulación se pueden ejecutar procesos de separación de petróleo y gas, procesos de destilación, incluyendo la destilación reactiva, procesos de ingeniería química y petroquímica en general y procesamiento de sólidos y polímeros (Dimian et al., 2014).

Capítulo III

Metodología

3.1 Introducción

La metodología desarrollada para la realización de la simulación de la separación de productos de reacción del reformado de glicerol en fase acuosa, empleando el software de simulación Pro II se detalla a continuación. Cabe señalar que todas las actividades se realizaron de forma no presencial debido a la emergencia sanitaria mundial, en el laboratorio de Planta Piloto y Fluidos Supercríticos ubicado en la Universidad de las Fuerzas Armadas, ESPE, Extensión Latacunga.

3.2 Extracción de datos

Los datos de los productos de reacción en fase líquida del reformado de glicerol se extrajeron de “Production of renewable hydrogen by aqueous-phase reforming of glycerol over Ni-Cu catalysts derived from hydrotalcite precursors” –Tuza et al. (2013) y se resumen en la Tabla 2.

Tabla 2

Datos de la reacción de reformado de glicerol.

Condiciones de la reacción	
Concentración inicial de glicerol	10 wt%
Catalizador	Ni ₂₀ Cu ₂₀
Temperatura de la reacción	270 °C
Conversión	59%
^a Agua	882,14 g/L
^a Glicerol	41,79 g/L
1,2 – propilenglicol	22 g/L
Ácido láctico	19 g/L (en catalizador Ni)

Condiciones de la reacción	
^b Acetol	22 g/L (en catalizador Ni ₂₀ Cu) y 3 g/L (en catalizador Ni)
^c 1,2 – butanodiol	0,1 g/L
^c Ciclopentanona	0,1 g/L
^c 2,5 – hexanodiona	0,1 g/L
^c 4-hidroxi-3-hexanona	0,1 g/L

Nota. a. Los cálculos se muestran en los anexos. b. Se consideran los 22 g/L para el acetol en lugar de los 3 g/L para la simulación. c. Son compuestos traza.

3.3 Separación del agua

La separación del agua del resto de productos orgánicos se simula en PRO II empleando la unidad de proceso llamada “Melter/ Freezer”, mismo que cuenta con una corriente de alimentación y dos de producto (sólido y líquido). Para este fin se ejecuta el algoritmo de la Figura 18.

3.4 Determinación de la Idealidad de la mezcla

Usando la herramienta “Binary VLE” en PRO II se ejecutan análisis binarios para todas las combinaciones posibles entre los compuestos involucrados, para determinar la presencia de azeótropos. Además, se analizan los coeficientes de actividad en cada mezcla binaria. Para este propósito se siguieron los siguientes pasos:

1. Abrir Pro II y crear una nueva simulación.
2. Definir el sistema de unidades de medida como *ENGLISH-SET1*, como se muestra en la Figura 19.
3. Ingresar los componentes, para ello presionar *Input* → *Component Selection* → *Select from list* → *Add Components* → *OK* → *OK*, acorde a la Figura 20.
4. Seleccionar el paquete termodinámico, siguiendo la secuencia mostrada en la Figura 21.

Figura 18

Algoritmo para congelación del agua.

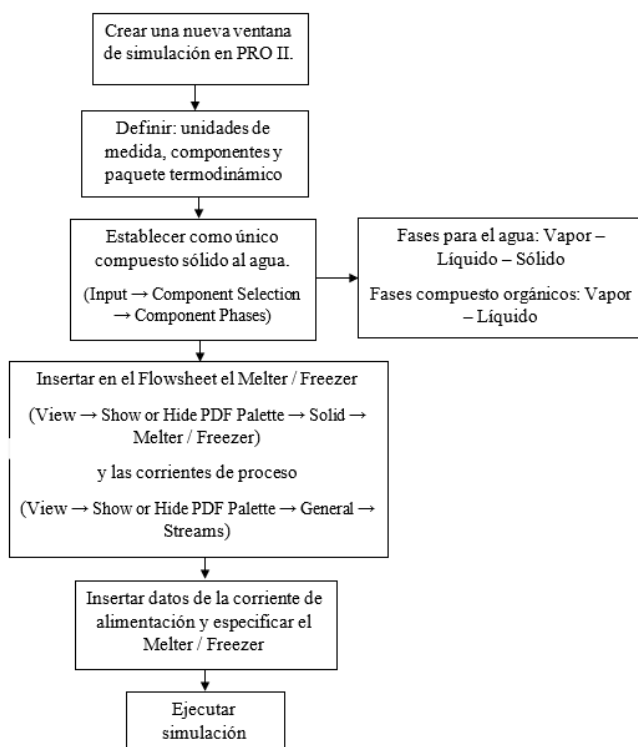


Figura 19

Definición de unidades de medida en PRO II.

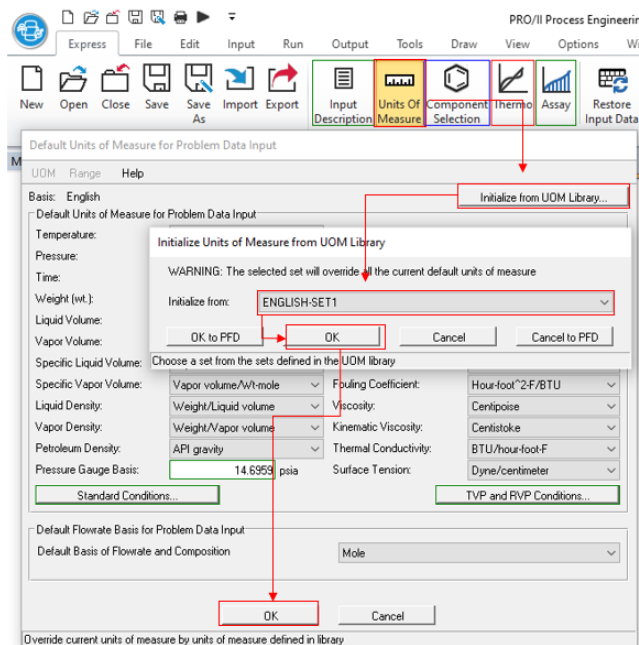


Figura 20

Selección de componentes en PRO II.

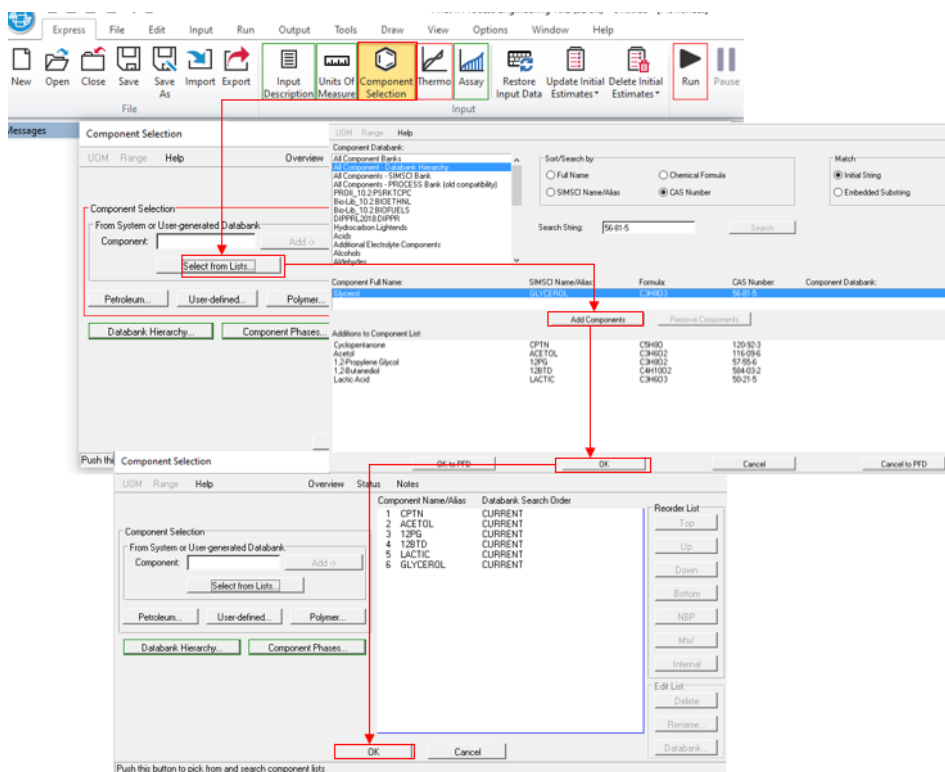
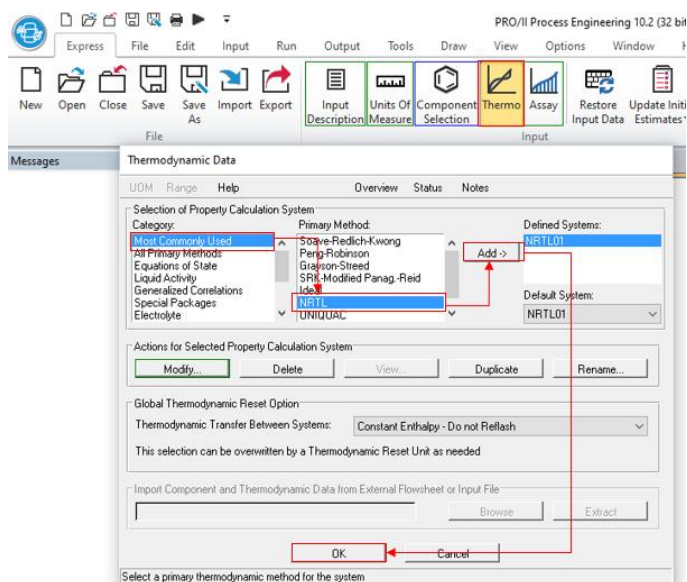


Figura 21

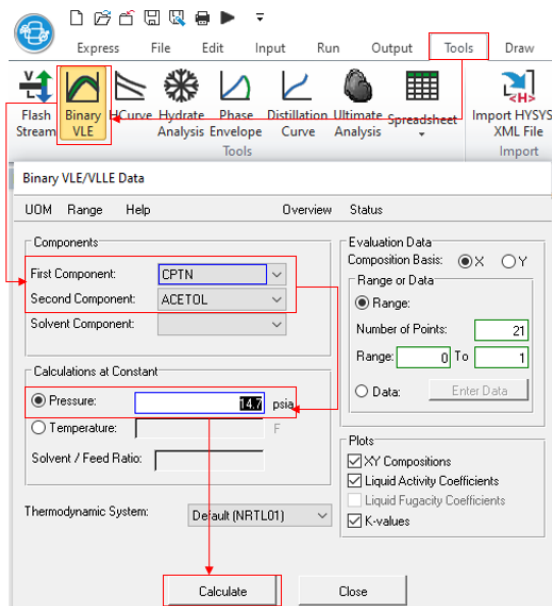
Selección del paquete termodinámico en PRO II.



5. Realizar el análisis para las mezclas binarias definiendo la presión en 14,7 psia (1 atm), el proceso se detalla en la Figura 22.
6. Analizar los diagramas x - y , T - x - y y K_{value} - x .
7. Analizar los coeficientes de actividad.

Figura 22

Análisis binario VLE en PRO II.



3.5 Orden de Volatilidad Relativa

Los compuestos en el software se ordenan según sus puntos de ebullición normal de menor (más volátiles o ligeros) a mayor (menos volátiles o pesados) (Kiss, 2013). Para verificar los valores del punto de ebullición, se ingresa a Input → Component Properties → Fixed. Además, se realizan curvas Presión de vapor vs. Temperatura, para verificar el orden de volatilidad relativa en un rango amplio de temperaturas.

Secuencias de Separación

El número de especies a separar son 6, sin embargo, dos de estos productos se encuentran a nivel traza. En este sentido, para la separación se consideran 4 productos

ya que las trazas saldrán como producto acompañadas de un compuesto en mayor proporción. Cabe enfatizar que dichas trazas se podrán separar mediante cristalización en fusión con porcentajes de pureza $\geq 99,8\%$, como se evidencia en el trabajo de Wang et al. (2020).

Para la separación de 4 productos pueden emplearse 5 secuencias de separación distintas, mismas que emplean 3 separadores cada una. Las secuencias de separación para 4 productos de la Tabla 3 deben ser ajustadas al sistema planteado en este trabajo.

Tabla 3

Secuencias de separación para cuatro productos.

N.º de Secuencia	Nombre de la Secuencia	Secuencia de Separación
1	a.	A/BCD B/CD C/D
2	b.	A/BCD BC/D B/C
3	c.	AB/CD A/B C/D
4	d.	ABC/D A/BC B/C
5	e.	ABC/D AB/C A/B

Nota. a: Secuencia directa. e: Secuencia indirecta.

Las modificaciones que se deben considerar para obtener las secuencias de separación de la Tabla 4 son las siguientes:

A = BC

B = DE

C = G

D = H

Donde, B: ciclopentanona; C: acetol; D: 1,2 – propilenglicol; E: 1,2 – butanodiol; G: ácido láctico y H: glicerol.

Tabla 4

Secuencias de separación para 6 productos con 2 trazas.

N.º de Secuencia	Nombre de la Secuencia	Separaciones
1	a.	BC/DEGH DE/GH G/H
2	b.	BC/DEGH DEG/H DE/G
3	c.	BCDE/GH BC/DE G/H
4	d.	BCDEG/H BC/DEG DE/G
5	e.	BCDEG/H BCDE/G BC/DE

Nota. Los componentes en rojo representan las trazas.

3.6 Velocidad marginal de vapor

Partiendo de las secuencias de separación obtenidas en el apartado anterior, se eliminan las separaciones repetidas y se clasifican según los componentes claves ligero y pesado. En este caso, las 10 separaciones de la Tabla 5 se analizarán con el método de velocidad marginal de vapor (MVR, por sus siglas en inglés).

Para la aplicación del método de MVR se considerará que la recuperación del componente clave ligero (LK) y clave pesado (HK) será de 99,9% y 0,1%, respectivamente.

En primer lugar, la presión del punto de ebullición del producto destilado se calcula empleando un separador flash (bloque “Flash” en PRO II) siguiendo el algoritmo de la Figura 23. El flash opera a 120 °F y se alimenta con una corriente a la misma temperatura, fracción de vapor igual a cero y los flujos molares de los compuestos

esperados como producto destilado acorde a la recuperación de LK y HK en cada separación.

Tabla 5

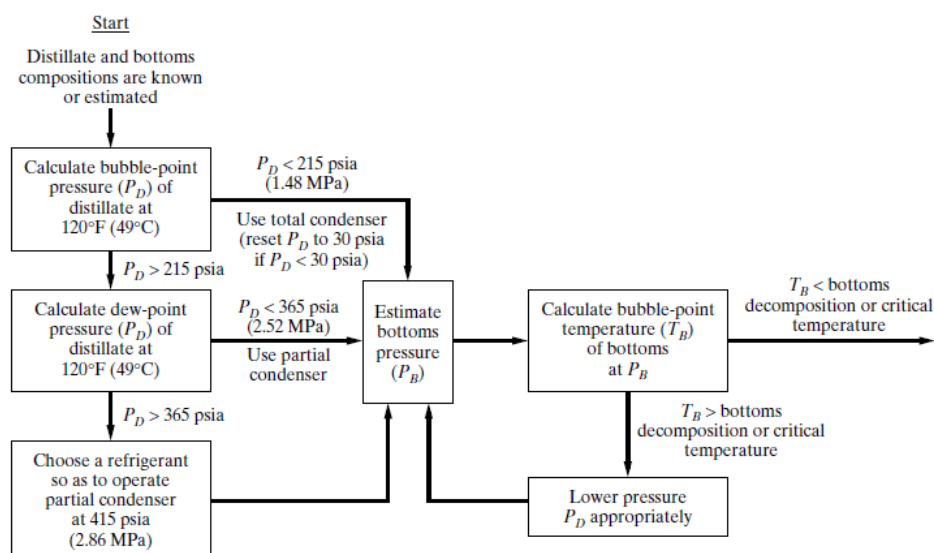
Separaciones clasificadas según los componentes clave.

Clave Ligero	Clave pesado	Separaciones
C	D	BC/DE BC/DEG BC/DEGH
D	G	DE/G DE/GH BCDE/G BCDE/GH
G	H	G/H DEG/H BCDEG/H

Nota. Las trazas se representan con rojo y en negrita se marcan las separaciones más sencillas.

Figura 23

Algoritmo para establecer la presión de la columna de destilación y el tipo de condensador.



Nota. Recuperado de *Product and process design principles Synthesis, Analysis, and Evaluation*, por Seider et al., 2009.

Seguidamente, con el mismo algoritmo se encuentra la presión del condensador y a partir de esta se determinan las presiones de alimentación y del hervidor con las ecuaciones 15 y 16 (Seider et al., 2009).

$$P_{\text{alimentación}} = P_{\text{condensador}} + 70 \text{ kPa} \quad [15]$$

$$P_{\text{hervidor}} = P_{\text{condensador}} + 35 \text{ kPa} \quad [16]$$

Después, se realiza la simulación de una columna “Shortcut” para hallar el flujo molar del destilado y la razón de reflujo. La corriente de alimentación que ingresa a la shortcut presenta la presión de alimentación calculada, fracción de vapor igual a cero y el flujo molar, únicamente, de los compuestos involucrados en la separación que esté siendo analizada.

La columna se especificará con todos los datos encontrados hasta el momento, y una relación R/R_{\min} de $z = 1,1 - 1,5$; considerando que el valor que se seleccione deberá aplicarse también para el modelado de las columnas de destilación (Hall, 2011)

El flujo de vapor se estima con la ecuación 17.

$$V = D(R + 1) \quad [17]$$

Donde,

V: flujo molar de vapor [lbmol/h]

D: flujo molar del destilado [lbmol/h]

R: razón de reflujo

Se le asigna un valor de cero a la MVR a las separaciones más simples de cada par de componentes clave, es decir, aquellas en las que se separan solo dos productos.

El valor de flujo de vapor de las especies con MVR cero se resta del flujo de vapor de las otras separaciones que tienen el mismo par de componentes clave y, este resultado será la MVR para dichas separaciones. Finalmente, se suman los valores individuales de MVR de las separaciones para hallar el MVR de cada secuencia de separación.

3.7 Datos Columnas de Destilación

Una vez hallada la secuencia de separación óptima, se procede a recolectar datos de número de etapas, etapa de alimentación y flujo molar del destilado del tren de separación empleando columnas de modelamiento aproximado en base a los componentes clave (shortcut).

De igual forma que en el análisis de MVR, las presiones de alimentación de la columna de destilación, presiones del condensador y hervidor, y tipo de condensador se determinan empleando el algoritmo de la Figura 23 y las ecuaciones 15 y 16.

Se utiliza una “shortcut” para hallar número de etapas, la etapa de alimentación y flujo molar del destilado de cada columna, lo cual se obtiene del reporte generado, una vez realizada la simulación. En este punto se considera que la corriente que ingresa a la primera columna contiene todas las especies a separar, mientras que la alimentación a las columnas 2 y 3 serán la corriente de productos de fondo de la torre anterior.

3.8 Tren de Separación

La simulación del proceso de destilación ordinaria se realiza empleando bloques de modelado de destilación riguroso, llamados Distillation en PRO II. Para entender este procedimiento se describe la simulación de la columna de destilación 1, el procedimiento para las torres 2 y 3 es análogo al de la 1 por lo cual no se detallan.

La columna 1 se configura con la secuencia de pasos siguientes:

1. Seleccionar en el PDF Palette → Column → Distillation
2. Con la columna seleccionada, dar click en el Flowsheet. En la ventana emergente, como la de la Figura 24, ingresar el número de etapas de la columna.
3. Al ingresar en la columna (Figura 25) se observan diferentes parámetros que se deben completar de forma obligatoria (rojo), opcional (verde), campo completo (azul). Los parámetros: Pressure Profile, Feeds and Products, Condenser, Performance Specifications y Tray Hydraulics / Packing son completados en los pasos siguientes.

- En el apartado "Pressure Profile" ingresar como presión del condensador y el hervidor 30 y 40,15 psia respectivamente seleccionando la opción de modo de especificación de presión por bandejas individuales, ver Figura 26.

Figura 24

Configuración de una columna Distillation en PRO II.

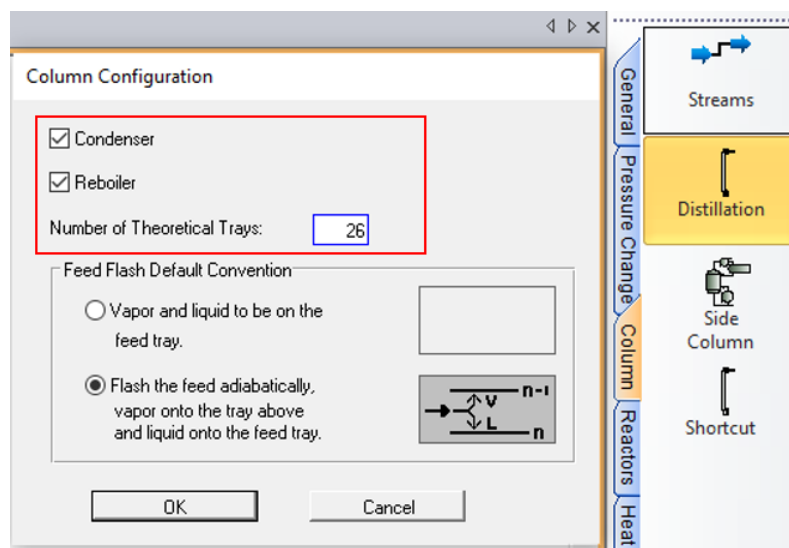


Figura 25

Interfaz de la columna Distillation.

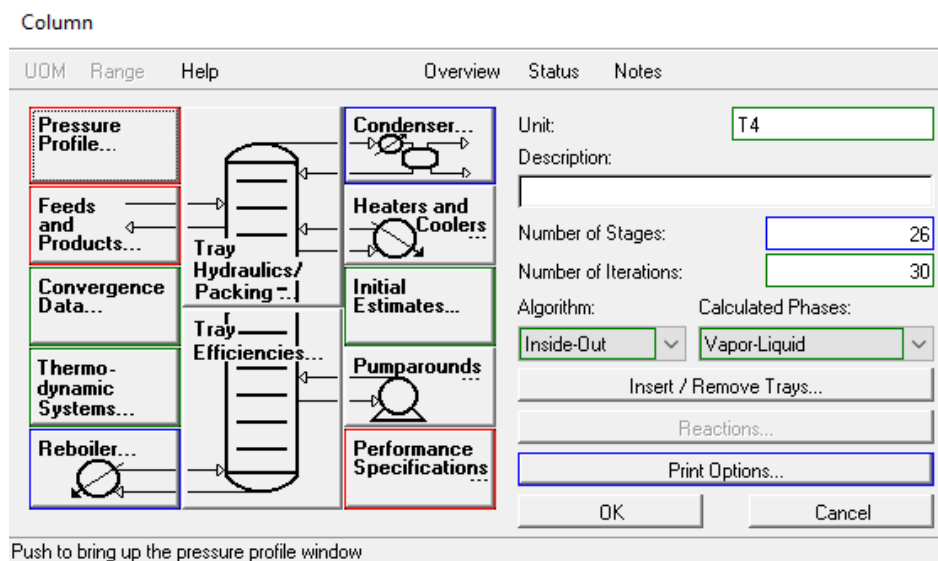


Figura 26

Perfil de presiones de la columna Distillation.

Column - Pressure Profile

UOM Define Range Help Overview

Pressure Specification Mode

Overall

By Individual Trays

Overall Specification

Top Tray Pressure: psia

Pressure Drop

Per Tray: psi

Column: psi

Individual Tray Specification

Cut	Tray	Pressure psia
Copy		
Paste	1	30
Insert	2	40.1554
Reset	3	
	4	
	5	

OK to PFD OK Cancel Cancel to PFD

- En “Feeds and Products” completar la etapa de alimentación y los flujos molares del destilado y el producto de fondo, como se indica en la Figura 27.

Figura 27

Alimentación y productos de la columna Distillation.

Column - Feeds and Products

UOM Define Range Help Overview

Feed	Tray	Feed Flash
S5	14	Separate

Feed Flash Default Convention

Vapor and liquid to be on the feed tray.

Flash the feed adiabatically, vapor onto the tray above and liquid onto the feed tray.

Product	Type of Product	Phase	Tray	Rate	
S6	Overhead	Liquid	1	29.6858	lb-mol/hr
S7	Bottoms	Liquid	26	95.0803	lb-mol/hr

Autogenerate Column Pseudo Streams

Condenser

Pumparound(s)

Reboiler

Pseudoproducts... Auto Pseudo Streams...

OK to PFD OK Cancel Cancel to PFD

Exit the window after saving all data

6. Verificar que la pestaña “Condenser” se encuentre marcada como Bubble Temperature e ingresar una presión de 30 psia (ver Figura 28).

Figura 28

Pestaña del condensador de la columna Distillation.

The image shows a software dialog box titled "Column - Condenser". It has a menu bar with "UOM", "Define", "Range", "Help", and "Overview". The main area is divided into several sections:

- Column with Condenser:** A checked checkbox.
- Condenser Type:** A group box containing four radio buttons:
 - Partial
 - Bubble Temperature** (selected)
 - Subcooled, Fixed Temperature
 - Subcooled, Fixed Temperature Drop
- Subcooled Reflux Only:** A group box containing two radio buttons:
 - Fixed Temperature
 - Fixed Temperature Drop** (selected)
- Condenser Data:** A group box containing several input fields:
 - Pressure: 30 psia (highlighted with a red box)
 - Temperature Estimate: [] F
 - Fixed Temperature: [] F
 - Degrees Subcooled: 0 F
 - Duty: [] x 10⁶ BTU/hr

At the bottom, there are four buttons: "OK", "Cancel", "OK to PFD", and "Cancel to PFD". A small note at the very bottom says "Exit the window after saving all data".

7. Para la columna 1, las especificaciones fueron el flujo molar de los componentes clave en el destilado, como muestra la Figura 29. Es importante señalar que las especificaciones pueden variar con el fin de obtener una mayor recuperación.
8. La pestaña Tray Hydraulics / Packing se especifica según las Figuras 30 y 31. La selección de una columna de “sieve trays” (bandejas o platos perforados), las cuales tienen un espaciado entre sí de 12 in se sustenta en que, las columnas con bandejas generalmente se prefieren para el inicio de la construcción de la Planta (Seider et al., 2009).

Por otro lado, el rango de espaciado entre platos aplicado en este trabajo es de 12 – 24 in, considerando que según Couper et al. (2012) los espacios entre bandejas son de 6 a 24 in, sin embargo, Coker (2010) menciona que para el espaciado entre platos, un valor igual a 15 in es el promedio, 9 in, 10 in y 12 in son aceptables y espaciados de 20 a 30 in se usan en operaciones de vacío. Además, el espacio entre bandejas puede variar según el diámetro de la columna, diseño del plato, caudales de vapor y líquido y las propiedades físicas

de los fluidos, en estos casos este parámetro puede tener valores entre 0,15 a 1 m (5,91 – 39,37 in) (Smith, 2005).

Figura 29

Ventana de especificaciones y variables de la columna Distillation.

Column - Specifications and Variables

UOM Range Help Overview

Add Specifications and Variables

Specifications:

Cut	1	COL1SPEC1 - Stream S6 Flowrate of component ACETOL on a Wet basis in lb-mol/hr = 29.53863139 within the default tolerance	Active:
Insert			<input checked="" type="checkbox"/>
Reset	2	COL1SPEC2 - Stream S6 Flowrate of component 12PG on a Wet basis in lb-mol/hr = 0.028784893 within the default tolerance	<input checked="" type="checkbox"/>

Variables:

Cut	1	Column T1 Duty of Heater CONDENSER	Active:
Insert	2	Column T1 Duty of Heater REBOILER	<input checked="" type="checkbox"/>
Reset			<input checked="" type="checkbox"/>

The number of active specifications, 2 equals the number of Variables, 2

Data changes in this window will reinitialize column estimates

OK to PFD OK Cancel Cancel to PFD

Exit the window after saving all data

Figura 30

Selección y colocación del número de platos para la columna Distillation.

Column - Tray Hydraulics

UOM Range Help Overview

Cut	Section Name	Starting Tray	Ending Tray	Internals	Calculation Type	Calculation Data
Insert	1 COLSECT-1	2	25	Trays	Sizing	Enter Data...
Reset	2					Enter Data...
	3					Enter Data...
	4					Enter Data...

Weeping Calculations for all Sieve Trays in all Tray Sections

OK to PFD OK Cancel Cancel to PFD

Exit the window after saving all data

Figura 31

Especificaciones para los platos de la columna Distillation

Column - Tray Sizing

UOM Range Help

Tray Type: SIEVE

Minimum Tray Diameter: 15 in

Tray Spacing: 12 in

Flooding Factor: %

System Loading Factor: 1

Number of Flow Paths: Calculated

Estimated Diameter: in

Weir Height: in

Weir Length: in

Perform Tray Sizing Calculations

At output time

During column convergence and do not update pressure profile

During column convergence and update the pressure profile

Calculated pressure drop will be based on number of trays divided by a scaling factor of 1.00

OK to PFD OK Cancel Cancel to PFD

Exit the window after saving all data

3.9 Optimización del plato de alimentación

La economía del proceso es fundamental, y en función de ello la bandeja de alimentación debe seleccionarse. En conclusión, al realizar un análisis de sensibilidad, el plato de alimentación será aquel cuya localización demande menor energía en el hervidor.

El análisis de sensibilidad se realiza planteando un caso de estudio en PRO II. Para ello en la pestaña Input → Case Study → Define Case Study. El caso de estudio se define ingresando un parámetro y un resultado. El parámetro será la localización de la bandeja de alimentación, mientras que el resultado será el requerimiento energético del hervidor en determinada columna. Como ejemplo, en la Figura 32 se muestra el caso de estudio para la columna 1. En este caso la posición de la bandeja de alimentación (corriente S5) varía desde el plato 5 hasta el 19 en pasos de 1 y en función de esto se obtendrá el calor proporcionado al hervidor.

Para visualizar los resultados del caso de estudio es necesario generar una gráfica en la pestaña Output → Case Study → Plots. En la ventana emergente se nombra la gráfica, por ejemplo “QR1 vs Feed Stage”, como se aprecia en la Figura 33. En “Data” se deben especificar los ejes de cada variable y asignarles un nombre. Para

finalizar en “View” se mostrará el gráfico, el cual puede exportarse a Excel, donde además se halla una Tabla con las variables.

Figura 32

Caso de estudio en PRO II.

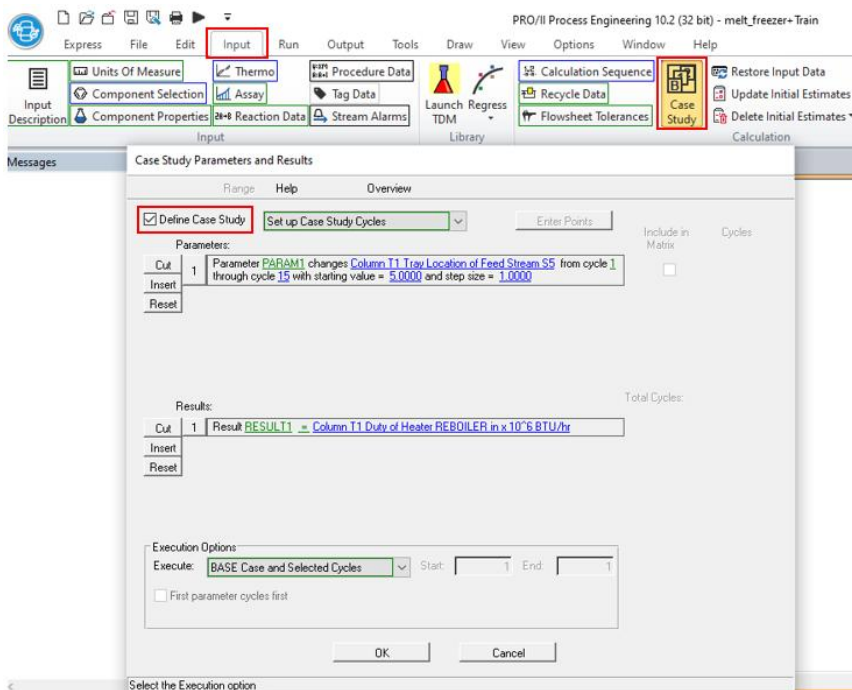
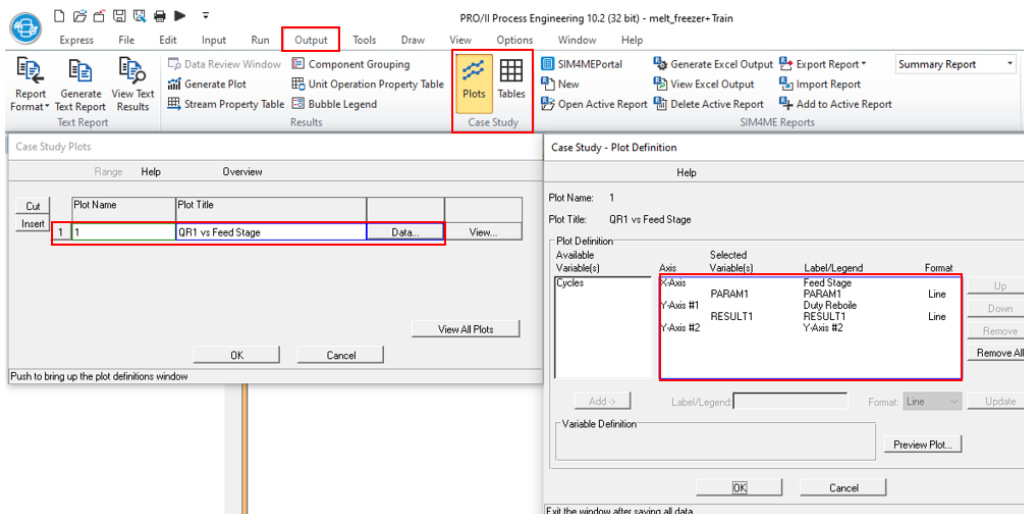


Figura 33

Generación de resultados del caso de estudio.



3.10 Costos

En este trabajo, para la estimación de los costos de compra de los equipos usados en el proceso de separación se emplean lineamientos establecidos por Seider et al. (2009). Además, para una estimación precisa los métodos de Mulet et al. (1981a,b) y Corripio et al. (1982a,b) se aplican para calcular el costo de las columnas de destilación, intercambiadores de calor (condensador, hervidor y calentador) y de la bomba.

Los métodos de estimación de costos mencionado anteriormente están formulados con un índice de costos de plantas de ingeniería química (CE) igual a 500, correspondiente al año 2006. Considerando esto, Seider et al. (2009) menciona que es necesario hacer una corrección de este índice CE para calcular el costo de compra de los equipos.

En el presente trabajo la corrección de índices CE para costos se realizará con un valor de 607,5. Este CE es el promedio anual de índice CE del año 2019, reportado por Jenkins (2020) en la revista Chemical Engineering, y se seleccionó ya que el promedio anual del 2020 y 2021 aún no han sido reportados.

La secuencia de cálculos para cada equipo se explica a continuación:

3.10.1 Columnas de destilación

De la simulación se extraen los datos de temperaturas y presiones del destilado y el fondo:

$$T_{\text{top}} = \text{Temperatura del Destilado } [^{\circ}\text{F}] \quad [18]$$

$$P_{\text{top}} = \text{Presión del Destilado [psig]} \quad [19]$$

$$T_{\text{bottoms}} = \text{Temperatura del Fondo } [^{\circ}\text{F}] \quad [20]$$

$$P_{\text{bottoms}} = \text{Presión del Fondo [psig]} \quad [21]$$

Con estos valores, la presión de operación (P_o) y temperatura de operación (T_o) de una torre serán las correspondientes del fondo de la misma (ecuación 22 y 23), esto con el objetivo de no subestimar los cálculos.

$$T_o [^{\circ}\text{F}] = T_{\text{bottoms}} \quad [22]$$

$$P_o [\text{psig}] = P_{\text{bottoms}} \quad [23]$$

La presión de diseño (P_d) se calcula con la ecuación 24, recordando que esta ecuación puede ser aplicada a P_o entre 10 a 1000 psig, y la temperatura de diseño (T_d) con la ecuación 25 (Seider et al., 2009):

$$P_d [\text{psig}] = \exp\{0,60608 + 0,91615[\ln(P_o)] + 0,0015655[\ln(P_o)]^2\} \quad [24]$$

$$T_d [^{\circ}\text{F}] = T_o + 50 \text{ } ^{\circ}\text{F} \quad [25]$$

Según Seider et al. (2009) la tensión máxima permitida (Maximum Allowable Stress, S) depende de la temperatura de diseño y del material de construcción, ya que una temperatura dada, diferentes composiciones de acero tienen diferentes valores para la tensión máxima permitida. En el método de Mulet et al. (1981a) se plantea que todas las ecuaciones son aplicables para acero al carbono, por tanto, en este trabajo, dicho material se selecciona tanto para la torre como para las bandejas. En el rango de temperatura recomendado, S puede leerse, en la Tabla 6, en función de T_d .

Tabla 6

Tensión máxima permitida en función de la temperatura de diseño.

Temperatura ($^{\circ}\text{F}$)	Tensión máxima permitida (psi)
-20 a 650	15000
700	15000
750	15000
800	14750
850	14200
900	13100

Nota. Recuperado de *Product and process design principles Synthesis, Analysis, and Evaluation*, por Seider et al., 2009

El diámetro interno (D_i) se determina por dimensionamiento de la torre en el software, donde se establece un espaciado entre bandejas de 12 in (1 ft) considerando que, para el espaciado entre platos, un valor igual a 15 in es el promedio, 9 in, 10 in y 12 in son aceptables y espaciados de 20 a 30 in se usan en operaciones de vacío (Couper et al., 2012).

Por otra parte, la altura de la torre (L) se calcula con la ecuación 26 (Luyben, 2013), considerando que el número de platos es $N_T - 2$ (restando el condensador y el hervidor) y las unidades de L dependerán de las unidades en las que se ingrese el espaciado entre bandejas (tray spacing). Además, acorde a Luyben (2013) se coloca un factor de 1,2 el cual representa un 20% más de altura adicional a la requerida solo para las bandejas, por heurística.

Según Luyben (2013), además de las bandejas se necesita espacio en la base para satisfacer dos requisitos. Primero, se necesita retención de líquido para la capacidad de sobretensión. En segundo lugar, la altura del líquido en la base de la columna debe ser lo suficientemente alta por encima de la elevación de la bomba de fondo para proporcionar los requisitos de carga neta de succión positiva (NPSH, por sus siglas en inglés) necesarios de la bomba del hervidor.

Cabe enfatizar que la capacidad de sobretensión hace referencia a la función de estabilidad que brindan ciertos equipos llamados tambores o tanques. Estos recipientes se caracterizan por que básicamente carecen de partes internas y se ubican entre equipos principales para proveer alimento a otro equipo o acumular producto. En el caso de la destilación los tambores de reflujo se encuentran entre el condensador y/o hervidor y la columna (Couper et al., 2012). Así, por ejemplo, un tambor de reflujo ubicado estratégicamente después del condensador almacena el condensado y recircular el reflujo nuevamente a la columna, lo cual es esencial en el arranque del equipo, y regula la retención del líquido (Couper et al., 2012; Górak & Schoenmakers, 2014; Smith, 2012). De igual forma si se coloca delante del hervidor, el tanque de reflujo evitará que los tubos se sequen (Couper et al., 2012)

$$L = 1,2 (\text{tray spacing})(N_T - 2) \quad [26]$$

Según Seider et al. (2009), la eficiencia de soldadura (E) explica principalmente la integridad de la soldadura para la costura longitudinal. Para acero al carbono de hasta 1,25 in de espesor, solo es necesaria una prueba de rayos X al 10% de la soldadura y se debe usar un valor de 0,85 para E. Para espesores de pared más grandes, se requiere una verificación de rayos X del 100%, lo que da un valor de 1,0 para E. El método sugiere que para recipientes a presión verticales se considere un espesor de pared de 1,25 in, por lo tanto:

$$E = 0,85 \quad [27]$$

El espesor de pared para soportar la presión interna (t_p) en ausencia de consideraciones de corrosión, viento y terremoto y para presiones internas mayores que la presión externa (es decir, excluyendo la operación de vacío), se calcula a partir de la ecuación 28 (Seider et al., 2009):

$$t_p[\text{in}] = \frac{P_d D_i}{2SE - 1,2 P_d} \quad [28]$$

El diámetro exterior del recipiente vertical (D_o) se consigue sumando el espesor de pared al diámetro interno (Seider et al., 2009):

$$D_o[\text{in}] = D_i + 1,25 \text{ in} \quad [29]$$

En la ecuación 28 no se toma en cuenta el efecto del viento o un terremoto a los cuales una columna puede verse enfrentada. El método de Mulet et al. (1981b) asume una carga de viento sustancial basada en una velocidad del viento de 140 millas/h, actuando uniformemente sobre la altura de la columna. Entonces el espesor necesario para soportar la carga del viento o un terremoto en la parte inferior de la columna (t_w) es:

$$t_w[\text{in}] = \frac{0,22(D_o + 18)L^2}{S D_o^2} \quad [30]$$

Para determinar el espesor promedio de la pared (t_v) de una torre para resistir la presión interna en la parte superior de la columna y para resistir la carga del viento o un terremoto equivalente, además de la presión interna en la parte inferior de la columna, Mulet et al. (1981a) propone seguir las ecuaciones 31 y 32. Además, sugiere que incluso para condiciones no corrosivas, se debe agregar un margen de corrosión, t_c , de 1/8 in a t_v (ecuación 34).

$$t_{P,W}[\text{in}] = t_p + t_w \quad [31]$$

$$t_v = \frac{t_p + t_{P,W}}{2} \quad [32]$$

$$t_c = \frac{1}{8} \text{ in} = 0,125 \text{ in} \quad [33]$$

$$t_{v,c} = t_v + t_c \quad [34]$$

Acorde a Seider et al., 2009, el espesor de la carcasa (t_s), se consigue en valores nominales proporcionados en la Tabla 7, al tener en cuenta que generalmente son fabricadas con placas de metal. El t_s final se obtiene redondeando al incremento superior.

Tabla 7

Incrementos del espesor de placas de metal.

$\frac{1}{16}$ in incrementos para $\frac{3}{16}$ a $\frac{1}{2}$ in
$\frac{1}{8}$ in incrementos para $\frac{5}{8}$ a 2 in
$\frac{1}{4}$ in incrementos para $2\frac{1}{4}$ a 3

Nota. Recuperado de *Product and process design principles Synthesis, Analysis, and Evaluation*, por Seider et al., 2009.

El peso de la columna se calcula a partir de la ecuación 35, considerando que “ ρ es la densidad del acero al carbono, que se puede tomar como 490 lb/ft³ o 0,284 lb/in³” (Seider et al., 2009).

$$W = \pi(D_i + t_s)(L + 0,8D_i) t_s \rho \quad [35]$$

El costo de compra de la torre incluyendo boquillas, entradas para manutención y para corrientes de proceso, y la retención de líquido (pero no platos y / o rellenos) (C_V) se determina con la ecuación 36, misma que puede ser aplicada si $9000 < W < 2500000$ (Seider et al., 2009).

$$C_V = \exp\{7,2756 + 0,18255[\ln(W)] + 0,02297[\ln(W)]^2\} \quad [36]$$

El costo adicional, C_{PL} , para plataformas y escaleras para torres con el diámetro interno y la longitud entre 3 – 24 ft y 27 – 170 ft, respectivamente se halla con la ecuación 37 (Seider et al., 2009).

$$C_{PL} = 300,9 (D_i)^{0,63316}(L)^{0,80161} \quad [37]$$

Se aplica la ecuación 38 para encontrar el costo de compra solo para la torre, plataformas y escaleras (C_P), considerando además el factor de material (F_M) de la Tabla 8. En la ecuación 38 se debe realizar también la corrección de costos con el índice CE (Seider et al., 2009).

$$C_P = F_M C_V + C_{PL} \quad [38]$$

Con respecto al costo de los platos, es necesario determinar los factores de número de bandejas (F_{NT}), tipo de bandeja (F_{TT}) y material de la bandeja (F_{TM}). Estos factores se determinan a partir de las ecuaciones 39 -40 y Tablas 9 y 10 (Seider et al., 2009).

$$F_{NT} = 1 \text{ si } NT > 20 \quad [39]$$

$$F_{NT} = \frac{2,25}{1,0414^{NT}} \text{ si } NT < 20 \quad [40]$$

Tabla 8

Factores de materiales de construcción, F_M , para recipientes con presión.

Material de construcción	Factor de material [F_M]
Acero carbono	1,0
Acero de baja aleación	1,2
Acero inoxidable 304	1,7
Acero inoxidable 316	2,1
Carpenter 20CB-3	3,2
Níquel-200	5,4
Monel-400	3,6
Inconel-600	3,9
Incoloy-825	3,7
Titanio	7,7

Nota. Recuperado de *Product and process design principles Synthesis, Analysis, and Evaluation*, por Seider et al., 2009.

Tabla 9

Factor de tipo de bandeja, F_{TT} .

Tipo de bandeja	F_{TT}
Tamiz	1,0
Válvula	1,18
Tapón de burbuja	1,87

Nota. Recuperado de *Product and process design principles Synthesis, Analysis, and Evaluation*, por Seider et al., 2009.

Tabla 10

Factor de material para bandejas, F_{TM} .

Material de construcción	F_{TM}
Acero carbono	1.0
Acero inoxidable 303	1,189+0,0577D _i
Acero inoxidable 316	1,401+0,0724D _i
Carpintero 20CB-3	1,189+0,0788D _i
Monel	1,189+0,1120D _i

Nota. Recuperado de *Product and process design principles Synthesis, Analysis, and Evaluation*, por Seider et al., 2009.

Así, el costo base de las bandejas (C_{BT}) se calcula con la ecuación 41, donde D_i es el diámetro interno de la columna en ft y la ecuación es válida para $2 < D_i < 16$ ft (Seider et al., 2009).

$$C_{BT} = 468 \exp(0,1739D_i) \quad [41]$$

El costo de instalación de las bandejas se estima con la ecuación 42, donde N_T es el número de bandejas. Se debe realizar la corrección de costos con el índice CE en esta ecuación (Seider et al., 2009).

$$C_T = N_T F_{NT} F_{TT} F_{TM} C_{BT} \quad [42]$$

Finalmente, el costo de compra total de la columna se estima con la ecuación 43 (Seider et al., 2009).

$$C_{columna} = C_P + C_T \quad [43]$$

3.10.2 Intercambiadores de calor

Para el caso de equipos que operan como intercambiadores de calor (HE, por sus siglas en inglés), es decir, los condensadores y hervidores de las torres, y el calentador empleado para elevar la temperatura de la corriente de alimentación que ingresa al tren de separación, se consideran los límites y parámetros de la Tabla 11 en base a que el método de Corripio et al. (1982b) los plantea para la estimación de costos de compra. Además, todos los HE se consideran del tipo de carcasa y tubos ya que son uno de los HE más importantes y usados en la mayoría de aplicaciones en plantas de procesamiento químico (Seider et al., 2009).

La subclasificación que se les asigna a los condensadores y al calentador son intercambiadores de calor de placas de tubos fijos, debido a que su construcción es simple, lo que implica bajo costo en su construcción. “De hecho, la placa de tubo fijo es el tipo de construcción menos costoso”(Sahoo, 2013, p. 274).

Y por otra parte, como menciona Shah & Sekulic (2003), se considera que los intercambiadores de placas de tubos fijos se utilizan para aplicaciones que involucran

temperaturas relativamente bajas (600 °F e inferiores) junto con presiones bajas (300 psig e inferiores).

Para el hervidor se selecciona un intercambiador de calor tipo kettle ya que generalmente este se usa para vaporizar o hervir (Seider et al., 2009) y como afirma Hall (2018), el mantenimiento y el control de los hervidores tipo kettle es fácil.

Tabla 11

Parámetros para estimación de costos de intercambiadores de calor.

Parámetro	Límites y características
Área (A)	150 – 12000 ft ²
Tubos	¾ in or 1 in O.D., 16 BWG (Birmingham Wire Gage)
Material de los tubos	Acero al carbono
Longitud de los tubos	20 ft
Arreglo de los tubos	cuadrado o triangular
Material de la carcasa	Acero al carbono
Presiones en el lado de la carcasa	100 psig

Nota. Información recuperada de *Estimate costs of heat exchangers and storage tanks via correlations*, por Corripio et al., 1982b.

- **Condensadores**

De la simulación se extrae el requerimiento energético del condensador, Q_c [Btu/h]. La temperatura de la corriente caliente a la entrada y salida es igual a la temperatura del condensador según Seider et al. (2009), como lo expresa la ecuación 44.

$$T_{H,out} = T_{H,in} = T_{\text{condensador}} [^{\circ}\text{F}] \quad [44]$$

La corriente de enfriamiento usa agua como fluido de enfriamiento en un rango de 90 a 120 ° F, ya que como explica Seider et al. (2009), el refrigerante más común es el agua, que, por heurística, generalmente ingresa al intercambiador de utilidades a 90 °F y sale a 120 °F. Entonces:

$$T_{C,in} [^{\circ}\text{F}] = 90 \text{ } ^{\circ}\text{F} \quad [45]$$

$$T_{C,out} [^{\circ}\text{F}] = 120 \text{ } ^{\circ}\text{F} \quad [46]$$

El coeficiente total de transferencia de calor (U) para el condensador de una columna de destilación sugerido por Seider et al. (2009) es:

$$U = 100 \frac{\text{Btu}}{\text{h ft}^2 \text{ } ^{\circ}\text{F}} \quad [47]$$

La temperatura media logarítmica (ΔT_{LM}) se calcula considerando las ecuaciones 48, 49 y 50 (Seider et al., 2009).

$$\Delta T_1 [^{\circ}\text{F}] = T_{H,out} - T_{C,in} \quad [48]$$

$$\Delta T_2 [^{\circ}\text{F}] = T_{H,in} - T_{C,out} \quad [49]$$

$$\Delta T_{LM} [^{\circ}\text{F}] = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln \left(\frac{\Delta T_1}{\Delta T_2} \right)} \quad [50]$$

El área del condensador se despeja de la ecuación 51, resultando la ecuación 52 (Seider et al., 2009).

$$Q = U A \Delta T_{LM} \quad [51]$$

$$A = \frac{Q_c}{U \Delta T_{LM}} \quad [52]$$

El costo base del condensador se calcula con la ecuación 53 (Seider et al., 2009).

$$CB = \exp\{11,0545 - 0,9228[\ln(A)] + 0,09861[\ln(A)]^2\} \quad [53]$$

Los factores de material para combinaciones de materiales de tubo y carcasa (F_M), corrección de la longitud del tubo (F_L) y de presión (F_P) se determinan con las ecuaciones 54 a 55 y Tablas 12 y 13 (Seider et al., 2009).

$$F_M = a + \left(\frac{A}{100} \right)^b \quad [54]$$

$$F_p = 0,9803 + 0,018 \left(\frac{P}{100} \right) + 0,0017 \left(\frac{P}{100} \right)^2 \quad [55]$$

Tabla 12

Factores para materiales de construcción, F_M , para intercambiadores de calor de carcasa y tubos.

Materiales de construcción	a (in)	b (in)
Coraza/tubo		
Acero al carbono/Acero al carbono	0,00	0,00
Acero al carbono/Latón	1,08	0,05
Acero al carbono/Acero inoxidable	1,75	0,13
Acero al carbono/Monel	2,1	0,13
Acero al carbono/Titanio	5,2	0,16
Acero al carbono/Acero Cr – Mo	1,55	0,05
Acero al Cr – Mo/Acero al Cr – Mo	1,70	0,07
Acero inoxidable/Acero inoxidable	2,70	0,07
Monel/Monel	3,3	0,08
Titanio/Titanio	9,6	0,06

Nota. Recuperado de *Product and process design principles Synthesis, Analysis, and Evaluation*, por Seider et al., 2009.

Tabla 13

Factor de corrección de la longitud del tubo, F_L , para intercambiadores de calor de carcasa y tubos.

Longitud del tubo (ft)	F_L
8	1,25
12	1,12
16	1,05
20	1,00

Nota. Recuperado de *Product and process design principles Synthesis, Analysis, and Evaluation*, por Seider et al., 2009.

Al final el costo de compra del compresor se calcula con la ecuación 56, donde se debe realizar la corrección de costos con el índice CE (Seider et al., 2009).

$$C_{\text{condensador}} = F_p F_M F_L C_B \quad [56]$$

- **Calentador**

El cálculo del costo de compra del calentador es igual al cálculo realizado para los condensadores, y cambiará el dato del requerimiento energético del equipo y además se consideran las siguientes temperaturas:

$$T_{H,out} = T_{H,in} = 220 \text{ [}^\circ\text{F]} \quad [57]$$

$$T_{C,in} \text{ [}^\circ\text{F]} = T_{feedHE} \text{ }^\circ\text{F} \quad [58]$$

$$T_{C,out} \text{ [}^\circ\text{F]} = T_{outHE} \text{ }^\circ\text{F} \quad [59]$$

Las temperaturas de entrada y salida de la corriente caliente aluden a que la fuente de calor común para calentar y/o vaporizar corrientes de proceso en un intercambiador de utilidades es el vapor de agua, que generalmente se aplica entre 220 y 450 °F (Seider et al., 2009). Por otro lado, las temperaturas de la corriente de entrada y salida fría se obtendrán de la simulación considerando la alimentación y producto del equipo.

- **Hervidores**

El requerimiento energético del hervidor, Q_r [Btu/h], se extrae de la simulación y se establece un flujo de calor (Flux) de 12000 Btu/(hr-ft²) por heurística (Seider et al., 2009). Así, el área del hervidor se calcula con la ecuación 60 y el costo base del mismo se halla con la ecuación 61, misma que está diseñada para un kettle vaporizer.

Por último, el costo de compra del hervidor se consigue aplicando la ecuación 62, donde los factores F_P , F_M y F_L se determinan en base a la metodología planteada en los condensadores para estos parámetros (Seider et al., 2009).

$$A = \frac{Q_r}{\text{Flux}} \quad [60]$$

$$C_B = \exp\{11,967 - 0,8709[\ln(A)] + 0,09005[\ln(A)]^2\} \quad [61]$$

$$C_{\text{hervidor}} = F_P F_M F_L C_B \quad [62]$$

3.10.3 Bomba

Por heurística la bomba se puede seleccionar considerando dos factores, que son la carga de la bomba (H) en ft y el flujo volumétrico (Q) en gpm. Las bombas centrífugas se usan para H de hasta 3200 ft y para Q entre 10 a 5000 gpm. Para cargas menores o iguales a 20000 ft y flujos volumétricos de hasta 500 gpm se usan bombas reciprocantes. Cuando $H \leq 40$ ft y el flujo volumétrico está en el rango de 20 – 100000 gpm las bombas axiales son adecuadas, mientras que las bombas rotativas se usan cuando $H \leq 3000$ ft y cuando Q se encuentra entre 1 a 1500 gpm (Seider et al., 2009).

Considerando los parámetros y correlaciones de Corripio et al. (1982a), en este trabajo se selecciona una bomba centrífuga radial (o simplemente, bomba centrífuga) para la estimación de costos de la bomba del diagrama de flujo de proceso.

Datos como las presiones de entrada y salida, densidad del fluido, carga de la bomba y flujo volumétrico se extraen de la simulación.

Según Seider et al. (2009) el factor de tamaño (S) se calcula con la ecuación 63, donde Q es el flujo volumétrico en gpm y H es la carga de la bomba en ft.

$$S[\text{gpm}(\text{ft}^{0,5})] = Q(H)^{0,5} \quad [63]$$

El método de Corripio et al. (1982a) muestra el cálculo del costo de compra de una bomba centrífuga de una etapa con construcción VSC de hierro fundido que opera a 3.600 rpm. Entonces, el costo base de la bomba se calcula con la ecuación 64.

$$C_B = \exp\{9,7171 - 0,6019[\ln(S)] + 0,0519[\ln(S)]^2\} \quad [64]$$

El costo de compra que incluye la base y el transmisor de trabajo de eje, pero no el motor eléctrico, se determina a partir de la ecuación 65 y las Tablas 14 y 15. Además, se debe realizar la corrección de costos con el índice CE (Seider et al., 2009).

$$C_{P,bomba} = F_T F_M C_B \quad [65]$$

Tabla 14

Tipos comunes de bombas centrífugas radiales y factores F_T .

No. de etapas	rpm del eje	Orientación de división de la carcasa	Rango de caudal (gpm)	Rango de carga de bomba (ft)	Hp máximo del motor	Factor $[F_T]$
1	3600	VSC	50-900	50-400	75	1,00
1	1800	VSC	50-3500	50-200	200	1,50
1	3600	HSC	100-1500	100-450	150	1,70
1	1800	HSC	250-5000	50-500	250	2,00
2	3600	HSC	50-1100	300-1100	250	2,70
2+	3600	HSC	100-1500	650-3200	1450	8,90

Nota. Recuperado de *Product and process design principles Synthesis, Analysis, and Evaluation*, por Seider et al., 2009.

Tabla 15

Factor de materiales de construcción, F_M , para bombas centrífugas.

Material de construcción	Factor de material $[F_M]$
Hierro fundido	1
Hierro dúctil	1,15
Acero fundido	1,35
Bronce	1,90
Acero inoxidable	2,00
Hastelloy C	2,95
Monel	3,30
Níquel	3,50
Titanio	9,70

Nota. Recuperado de *Product and process design principles Synthesis, Analysis, and Evaluation*, por Seider et al., 2009.

La eficiencia fraccional de la bomba (η_P) se determina a partir de la ecuación 66, considerando que es aplicable para flujos volumétricos entre 50 y 5000 gpm (Seider et al., 2009).

$$\eta_P = -0,316 + 0,24015[\ln(Q)] - 0,01199[\ln(Q)]^2 \quad [66]$$

La potencia, brake horsepower, por su denominación en inglés, en Hp (P_B) se calcula con la ecuación 67 con la densidad (ρ) en lb/gal, mientras que la eficiencia fraccional del motor eléctrico (η_M) con la ecuación 68, considerando que para esta última, el valor de P_B debe estar en el rango de 1 a 15000 Hp (Seider et al., 2009).

$$P_B = \frac{QH\rho}{33000\eta_P} \quad [67]$$

$$\eta_M = 0,80 + 0,0319[\ln(P_B)] - 0,00182[\ln(P_B)]^2 \quad [68]$$

Según Seider et al. (2009) al dividir P_B entre η_M se encuentra el consumo de energía del motor (P_C) a partir de la ecuación 69 y con la ecuación 70 se calcula el costo base del motor, para $1 < P_C < 700$ Hp.

$$P_C = \frac{P_B}{\eta_M} \quad [69]$$

$$C_B = \exp\{5,8259 + 0,13141[\ln(P_C)] + 0,053255[\ln(P_C)]^2 + 0,028628[\ln(P_C)]^3 - 0,0035549[\ln(P_C)]^4\} \quad [70]$$

El costo de compra del motor eléctrico se determina con la ecuación 71 y la Tabla 16, donde, además se debe realizar la corrección de costos con el índice CE (Seider et al., 2009). En este trabajo se selecciona un motor que funcione a 3600 rpm, con una carcasa abierta a prueba de goteo en base a las correlaciones de costos de motores eléctricos planteadas por Corripio et al. (1982a).

$$C_{P,motor} = F_T C_B \quad [71]$$

Así el costo de compra total de la bomba se calcula con la ecuación 72 (Seider et al., 2009).

$$C_{bomba} = C_{P,bomba} + C_{P,motor} \quad [72]$$

Tabla 16

Factores F_T y rangos para motores eléctricos.

Tipo de carcasa del motor	3600 rpm	1800 rpm
Carcasa abierta a prueba de goteo, de 1 a 700 Hp	1,0	0,90
Totalmente cerrado, refrigerado por ventilador, de 1 a 250 Hp	1,4	1,3
Carcasa a prueba de explosiones, de 1 a 250 Hp	1,8	1,7

Nota. Recuperado de *Product and process design principles Synthesis, Analysis, and Evaluation*, por Seider et al., 2009.

3.10.4 Cristalizador

El flujo de producción de cristales en toneladas por día se extrae de la simulación y para calcular el costo de compra de un cristalizador del tipo draft – tube baffled (DTB) que opera para flujos de cristales entre 10 y 250 ton/día se usa la ecuación 73 (Seider et al., 2009).

$$C_{\text{cryst}} = 28200 W^{0,63} \quad [73]$$

Capítulo IV

Análisis y discusión de resultados

4.1 Concentraciones de Agua y Glicerol

Con los datos extraídos de Tuza et al. (2013), considerando además que la variación del volumen de la solución es mínima, se asume que el volumen es constante y se hallan las siguientes concentraciones, los cálculos en detalles se muestran en los anexos:

$$C_{\text{glicerol}} = 41,79 \frac{\text{g}}{\text{L}} \quad [74]$$

$$C_{\text{agua}} = 882,14 \frac{\text{g}}{\text{L}} \quad [75]$$

4.2 Trenes de Separación

Los trenes de separación desarrollados en este trabajo se realizaron bajo los siguientes parámetros:

- De los productos del reformado de glicerol reportados por Tuza et al (2013), se eliminaron, específicamente las trazas de 2,5 – hexanodiona y 4 – hidroxí – 3 – hexanona debido a que dichos compuestos no se encuentran en la base de datos de PRO II.
- Los flujos molares de las especies, como se muestran en la Tabla 17, se calcularon planteando como base de cálculo un flujo molar total de alimentación 5000 lbmol/h, ya que, para valores inferiores, los flujos volumétricos de las corrientes de producto resultaron bajos considerando que se trata de un proceso industrial.

4.3 Primer sistema de separación

Inicialmente se diseñó un tren de separación para los 7 productos de la Tabla 17, los cuales se reducen a 5 considerando que las trazas se separaran en conjunto con otro componente. Estos forman una mezcla ideal, como lo muestran los datos de la Tabla 18, por lo que se aplica la destilación ordinaria para su separación como lo

sugiere Seider et al.(2009), quien menciona que cuando la alimentación es una mezcla casi ideal, la secuencia de equipos de destilación ordinaria será la más económica, siempre y cuando se cumplan ciertos requisitos, que son, la volatilidad relativa mayor a 1,05, que el calor proporcionado al hervidor no sea excesivo y que los azeótropos no impidan la separación deseada, entre otros.

Tabla 17

Flujo molar por componente en la alimentación.

Compuesto	Simbología	Concentración másica [g/L]	Fracción molar	Flujo molar [lbmol/h]
Agua	A	882,14	0,98	4875,23
Ciclopentanona	B	0,1	2,4E-05	0,12
Acetol	C	22	0,006	29,57
1,2 – propilenglicol	D	22	0,006	28,78
1,2 – butanodiol	E	0,1	2,2E-05	0,11
Ácido láctico	G	19	0,004	21,001
Glicerol	H	41,79	0,01	45,18

Nota. Los componentes en rojo son trazas.

A pesar que se muestra la presencia de un azeótropo en la mezcla binaria agua – ciclopentanona no se considera la mezcla no ideal pues en solución se encuentran más especies químicas y la ciclopentanona está a nivel traza. Además, como productos individuales se obtuvieron acetol, ácido láctico y glicerol y como productos en mezcla se obtuvo agua con trazas de ciclopentanona y 1,2 – propilenglicol con trazas de 1,2 – butanodiol.

Las trazas de ciclopentanona y 1,2 – butanodiol se podrán separar posteriormente mediante la aplicación de cristalización en estado fundido. Como menciona Seider et al. (2009) la cristalización en estado fundido se emplea para separar productos orgánicos con puntos de fusión comparables y según Myerson et al. (2019) esta técnica se caracteriza por la alta selectividad lo que permite obtener productos puros en una sola etapa de separación.

Tabla 18

Presencia de azeótropos en el primer sistema de separación.

Componente 1	Componente 2	Azeótropos
Agua	ciclopentanona	Sí
	Acetol	No
	1,2 – propilenglicol	No
	1,2 – butanodiol	No
	Ácido Láctico	No
	Glicerol	No
Ciclopentanona	Acetol	No
	1,2 – propilenglicol	No
	1,2 – butanodiol	No
	Ácido Láctico	No
Acetol	Glicerol	No
	1,2 – propilenglicol	No
	1,2 – butanodiol	No
	Ácido Láctico	No
1,2 – propilenglicol	Glicerol	No
	1,2 – butanodiol	No
	Ácido Láctico	No
1,2 – butanodiol	Glicerol	No
	Ácido Láctico	No
Ácido Láctico	Glicerol	No

La volatilidad relativa entre componentes clave en todas las separaciones fue mayor a 1,05. Los resultados en relación a este parámetro se encuentran en la Tabla 19, cabe señalar que la ciclopentanona y el 1,2 – butanodiol no se consideran como componentes clave por estar a nivel traza y porque además se obtienen como un producto en solución con otro.

Además, mediante un diagrama Presión de vapor vs. Temperatura, donde esta última varían entre 77 – 600 ° F, se evaluó la volatilidad de los componentes en este rango de temperaturas, ya que en este intervalo se encuentran las temperaturas de operación de las columnas de destilación.

Como se observa en la Figura 34, el orden de volatilidad de la ciclopentanona y el acetol cambian alrededor de los 450 ° F. Este comportamiento no altera los resultados, pues las torres de destilación en que se separan estos compuestos operan a temperaturas menores que la temperatura de 450 ° F.

Tabla 19

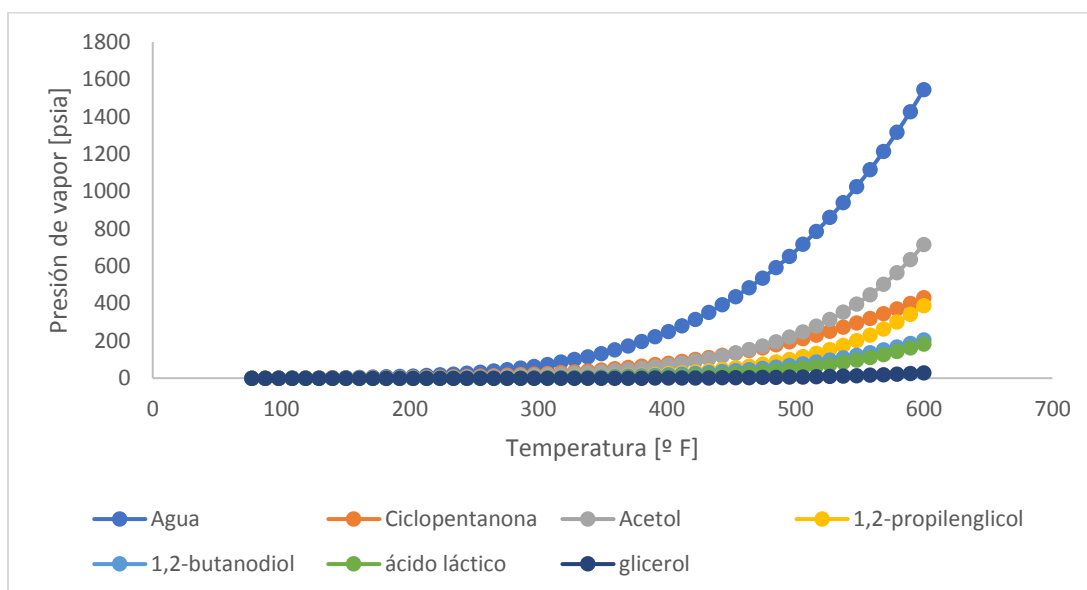
Volatilidad relativa en el primer sistema de separación.

Compuesto	Simbología	Temperatura de ebullición [°F]	Presión de vapor a 77 °F [psia]	Volatilidad Relativa (α_{ij})
Agua	A	212,00	0,46	6,65 ^a
Ciclopentanona	B	267,17	0,22	27,72 ^b
Acetol	C	293,90	0,07	
1,2 – propilenglicol	D	369,68	0,0025	36,31 ^c
1,2 – butanodiol	E	381,20	0,0015	
Ácido láctico	G	422,33	6,87E-05	21,23 ^d
Glicerol	H	550,13	3,23E-06	

Nota. a: α_{AC} . b: α_{CD} . c: α_{DG} . d: α_{GH} .

Figura 34

Presión de vapor vs. Temperatura para el primer sistema de separación.



Se aplicó el método de velocidad marginal de vapor para determinar la secuencia óptima. En el MVR se analizaron 14 secuencias de las cuales la secuencia directa posee el menor valor de MVR igual a 923,17 lbmol/h por lo que está secuencia fue seleccionada. Esta secuencia se representa en la Figura 35, la cual corresponde a la separación de 5 productos empleando 4 columnas de destilación. La simulación de la Figura 36 se ejecutó y en resumen los datos de este proceso se muestran en la Tabla 20, cabe señalar que estos datos se extrajeron después de que se realizó el dimensionamiento y optimización de la etapa de alimentación de la torre.

Figura 35

Diagrama de secuencia del primer sistema de separación.

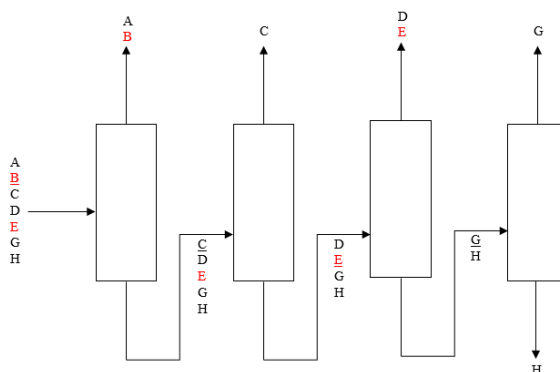


Figura 36

Primer sistema de separación.

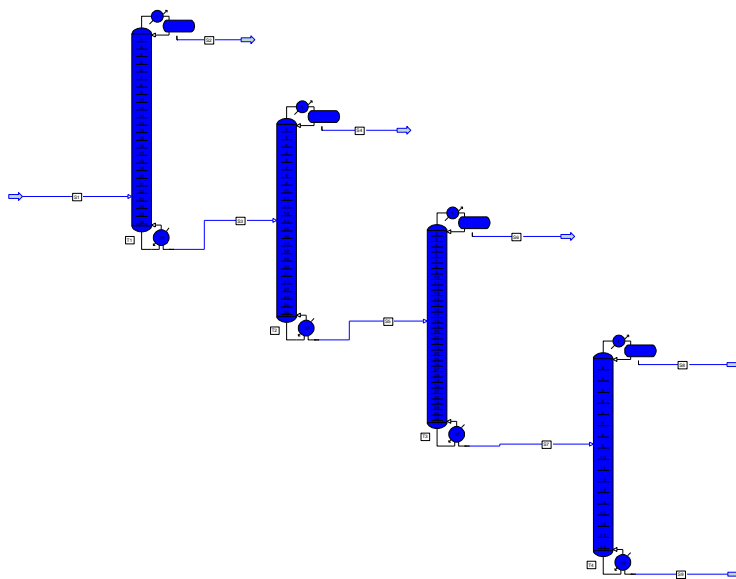


Tabla 20*Resultados del primer sistema de separación.*

Parámetro	Columna 1	Columna 2	Columna 3	Columna 4
Flujo molar destilado [lbmol/h]	4870,51	34,41	28,89	21,03
Composición Destilado [lbmol/h]				
Agua	4870,36	4,88	0	0
Ciclopentanona	0,12	4,2E-06	1,6E-09	0
Acetol	0,03	29,51	0,03	3E-13
1,2 – propilenglicol	6,1E-19	0,03	28,73	0,03
1,2 – butanodiol	3,7E-25	7,2E-06	0,11	6,6E-05
Ácido láctico	0	3E-08	0,02	20,96
Glicerol	0	0	0	0,05
Flujo molar fondo [lbmol/h]	129,49	95,08	66,19	45,16
Composición del fondo [lbmol/h]				
Agua	4,88	1,9E-25	0	0
Ciclopentanona	4,2E-06	1,6E-09	9,5E-20	0
Acetol	29,54	0,03	3E-13	7E-23
1,2 – propilenglicol	28,78	28,76	0,03	2,4E-08
1,2 – butanodiol	0,11	0,11	6,6E-05	4,4E-11
Ácido láctico	21	21	20,98	0,02
Glicerol	45,18	45,18	45,18	45,14
Razón de reflujo	0,37	0,76	2,35	0,72
Plato de alimentación	23	14	18	9
Presión de operación [psia]	32,95	32,06	32,72	31,68
Temperatura del destilado [°F]	250,4	316,1	412,7	464,5
Temperatura del fondo [°F]	281,6	477,8	531,6	607,2
Material de la columna	Acero al carbono	Acero al carbono	Acero al carbono	Acero al carbono
Tipo de plato	Bandejas perforadas	Bandejas perforadas	Bandejas perforadas	Bandejas perforadas
Grosor de pared [in]	0,31	0,25	0,25	0,25
Altura [ft]	60	30	42	20,4
Diámetro interno [ft]	10	2,5	2,5	2,5
Costo [\$]	448452,92	131920,59	144889,93	123679,38

Si bien es cierto que el objetivo de separar las 7 especies se cumple con una secuencia de 4 columnas de destilación, con el objetivo de reducir el número de columnas y considerando que una mezcla ternaria puede dividirse en sus componentes usando destilación con corrientes laterales o un sistema Petliuk se analiza la aplicación de estos procesos para la corriente del fondo de la columna 2 (S_5). La mezcla ternaria en este caso está formada por la mezcla de 1,2 – propilenglicol y 1,2 – butanodiol (A), ácido láctico (B) y glicerol (C) con flujos molares iguales a los que se observa en la Tabla 21.

Tabla 21

Resultados de la columna 2 del primer sistema de separación.

Compuesto	Flujo Alimentación (S_3) [lbmol/h]	Flujo Destilado (S_4) [lbmol/h]	Flujo Fondo (S_5) [lbmol/h]
Agua	4,88	4,88	1,9E-25
Ciclopentanona	4,2E-06	4,2E-06	1,6E-09
Acetol	29,54	29,51	0,03
1,2 – propilenglicol	28,78	0,03	28,76
1,2 – butanodiol	0,11	7,2E-06	0,11
Ácido láctico	21,001	3E-08	21,001
Glicerol	45,18	0	45,18

Nota. Los compuestos en negrita representan la mezcla ternaria.

Según Seider et al. (2009), la destilación con flujos laterales implica requisitos de reflujo excesivos. Estos requisitos disminuyen siempre y cuando la alimentación de la especie con volatilidad intermedia, es decir de B, sea alta, y que además la cantidad de A (para destilación con corriente lateral superior) o C (para destilación con corriente lateral inferior) sea baja. Si existe el caso en que la alimentación es rica en B, pero también A y C están en cantidades considerables es recomendable usar un prefraccionador para retirar A y C y cumplir con la condición de flujo molar de B en mayor proporción que los otros componentes. La destilación con flujos laterales emplea un conjunto de prefraccionador – columna de destilación, que se conoce como sistema Petlyuk.

Acorde a lo anteriormente expuesto y considerando los datos de corriente S5 se concluye que la aplicación de estos sistemas de separación no es factible. Por lo cual se optó por otras técnicas de separación, descritas en lo que respecta al segundo sistema de destilación desarrollado.

4.4 Segundo sistema de separación

En este caso se consideran las especies químicas de la Tabla 17 a excepción del agua, la cual se elimina en una etapa previa a la secuencia de separación.

4.4.1 Separación de agua por cristalización

Evaluando los puntos de fusión de los componentes, extraídos de la base de datos de PRO II, los cuales se detallan en la Tabla 22, se estima que se puede eliminar el agua empleando cristalización exitosamente, ya que como lo expone Seader et al. (2010), en el caso de soluciones acuosas u orgánicas este procedimiento se consigue por enfriamiento de la solución y/o por evaporación del solvente.

Tabla 22

Puntos de fusión de los componentes a separar.

Compuesto	Simbología	Temperatura de fusión [°F]
Agua	A	32,00
Ciclopentanona	B	-60,34
Acetol	C	1,40
1,2 – propilenglicol	D	-76,00
1,2 – butanodiol	E	-173,2 ^a
Ácido láctico	G	62,15
Glicerol	H	64,72

Nota. a: Dato recuperado de Carbohydrate Chemistry: Fundamentals And Applications, por Alén, 2018.

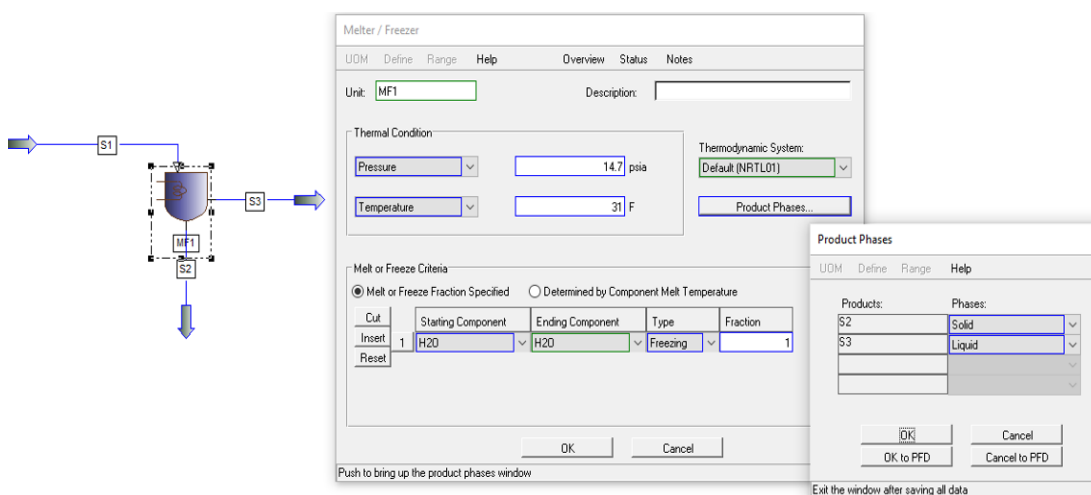
Los puntos de fusión del glicerol y del ácido láctico sugieren que estos compuestos se congelarían antes que el agua, sin embargo, es necesario aclarar que

dichas especies se consideran como sólidos no convencionales. Esto se sustenta en base a Kirk -Othmer (2007), quien menciona que es muy raro ver al glicerol en forma de cristal ya que posee una característica propia conocida como sobreenfriamiento, la cual produce una disminución significativa de su punto de congelación cuando se encuentra en una mezcla con agua, es así como una mezcla glicerol (66,7%) – agua (33,3%) tendrá un punto de congelación de $-46,5\text{ }^{\circ}\text{C}$ ($-51,7\text{ }^{\circ}\text{F}$). De igual forma, para el ácido láctico, Van Krieken (2007) reporta que la temperatura de cristalización de este compuesto es $-25\text{ }^{\circ}\text{C}$ ($-13\text{ }^{\circ}\text{F}$).

La simulación de este procedimiento se consigue con un Melter/ Freezer en PRO II, como el de la Figura 37, donde además se observan las especificaciones del equipo. La alimentación serán los flujos molares de la Tabla 17 a $14,7\text{ psia}$ y $77\text{ }^{\circ}\text{F}$.

Figura 37

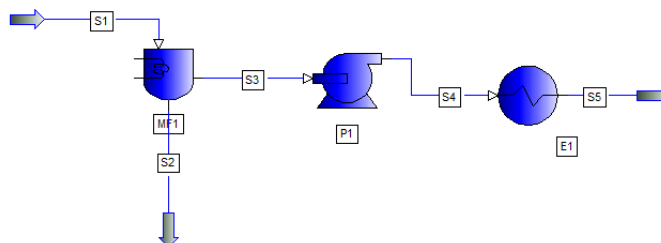
Simulación y especificación del Melter/ Freezer.



Los resultados del Melter/ Freezer (Tabla 23) muestran que la corriente líquida se encuentra a menor presión y temperatura de la que requiere la alimentación de las columnas de destilación (como se mostrará más adelante en este capítulo), por lo cual es necesario implementar una bomba y un calentador en la simulación.

Figura 38

Etapla previa al segundo tren de separación.



Los resultados de esta primera etapa (melter/ freezer, la bomba y el calentador), Figura 38, se observan en la Tabla 23, siendo la corriente S₅ la alimentación del tren de columnas de destilación.

Tabla 23

Resultados del Melter/ Freezer, la bomba y el calentador.

Parámetro	Corriente S ₁	Corriente S ₂	Corriente S ₃	Corriente S ₄	Corriente S ₅
Temperatura [°F]	77	30,99	30,99	31,09	77
Presión [psia]	14,7	14,7	14,7	35,08	35,08
Flujo molar [lbmol/h]					
Agua	4875,23	4875,23	0	0	0
Ciclopentanona	0,12	0	0,12	0,12	0,12
Acetol	29,57	0	29,57	29,57	29,57
1,2 – propilenglicol	28,78	0	28,78	28,78	28,78
1,2 – butanodiol	0,11	0	0,11	0,11	0,11
Ácido láctico	21,001	0	21,001	21,001	21,001

4.4.2 Idealidad de la mezcla

La Tabla 24 resume la presencia de azeótropos entre las mezclas binarias analizadas. Los diagramas de equilibrio $x - y$, $T - x - y$ y $K_{\text{value}} - x$, los cuales se encuentran en la sección de anexos.

En ningún caso se observa la presencia de azeótropos, los cuales reflejan desviaciones de la idealidad acorde a Dutta (2007), por lo cual se dice que la mezcla es ideal y la aplicación de la destilación ordinaria es factible, por las mismas razones expuestas para el primer sistema de separación.

Por otro lado, los resultados de los coeficientes de actividad que se observan en los anexos reafirman la idealidad de la mezcla, considerando que los coeficientes de las especies en una solución ideal son igual a 1 como expresa Al Shalabi & Sepehrnoori (2017).

Tabla 24

Presencia de azeótropos entre especies químicas a ser separadas usando columnas de destilación en el segundo sistema de separación.

Componente 1	Componente 2	Azeótropos	Coefficiente de actividad
Ciclopentanona	Acetol	No	1
	1,2 – propilenglicol	No	1
	1,2 – butanodiol	No	1
	Ácido Láctico	No	1
	Glicerol	No	1
Acetol	1,2 – propilenglicol	No	1
	1,2 – butanodiol	No	1
	Ácido Láctico	No	1
	Glicerol	No	1
1,2 – propilenglicol	1,2 – butanodiol	No	1
	Ácido Láctico	No	1
	Glicerol	No	0,89 (12PG) y 1 (glicerol)
1,2 – butanodiol	Ácido Láctico	No	1
	Glicerol	No	1
Ácido Láctico	Glicerol	No	1

Nota. 12PG es 1,2 – propilenglicol. Las celdas que tienen un solo valor de coeficiente de actividad se deben a que dicho parámetro es igual para ambas especies químicas.

4.4.3 Volatilidad relativa

Los compuestos a ser separados por destilación se ordenaron según su punto de ebullición normal de menor a mayor, porque la presión de vapor y la volatilidad son propiedades relacionadas entre sí.

Como sostiene Kiss (2013), los componentes más volátiles o ligeros de una mezcla son aquellos cuyo punto de ebullición es bajo, pero tienen mayor presión de vapor y los menos volátiles o pesados tendrán elevados puntos de ebullición y bajas presiones de vapor.

En la Tabla 25 se observan los compuestos en orden de volatilidad y además se muestra la volatilidad relativa entre componente clave ligero y pesado, para todos los casos resulta mayor a 1,05.

Tabla 25

Volatilidad relativa entre especies químicas a ser separadas usando columnas de destilación en el segundo sistema de separación.

Compuesto	Simbología	Temperatura de ebullición [°F]	Presión de vapor a 77 °F [psia]	Volatilidad Relativa (α_{ij})
Ciclopentanona	B	267,17	0,22	27,72 ^a
Acetol	C	293,90	0,07	
1,2 – propilenglicol	D	369,68	0,002	36,31 ^b
1,2 – butanodiol	E	381,20	0,001	
Ácido láctico	G	422,33	6,9E-05	21,23 ^c
Glicerol	H	550,13	3,2E-06	

Nota. a: α_{CD} . b: α_{DG} . c: α_{GH} .

Además, mediante un diagrama Presión de vapor vs. Temperatura, donde esta última varían entre 77 – 600 ° F, se evaluó la volatilidad de los componentes en el este rango de temperaturas, ya que en este intervalo se encuentran las temperaturas de operación de las columnas de destilación.

Como se observa en la Figura 39, el orden de volatilidad de la ciclopentanona y el acetol cambian alrededor de los 450 ° F, esto no altera los resultados pues las columnas de destilación en las que se separan estos componentes trabajan a temperaturas menores.

4.4.4 Secuencias de separación

Las 5 secuencias de separación de la Figura 40 se determinaron considerando la separación de 6 especies químicas (dos de ellos trazas) en 4 productos usando 3 columnas de destilación.

Figura 39

Presión de vapor vs. Temperatura del segundo sistema de separación.

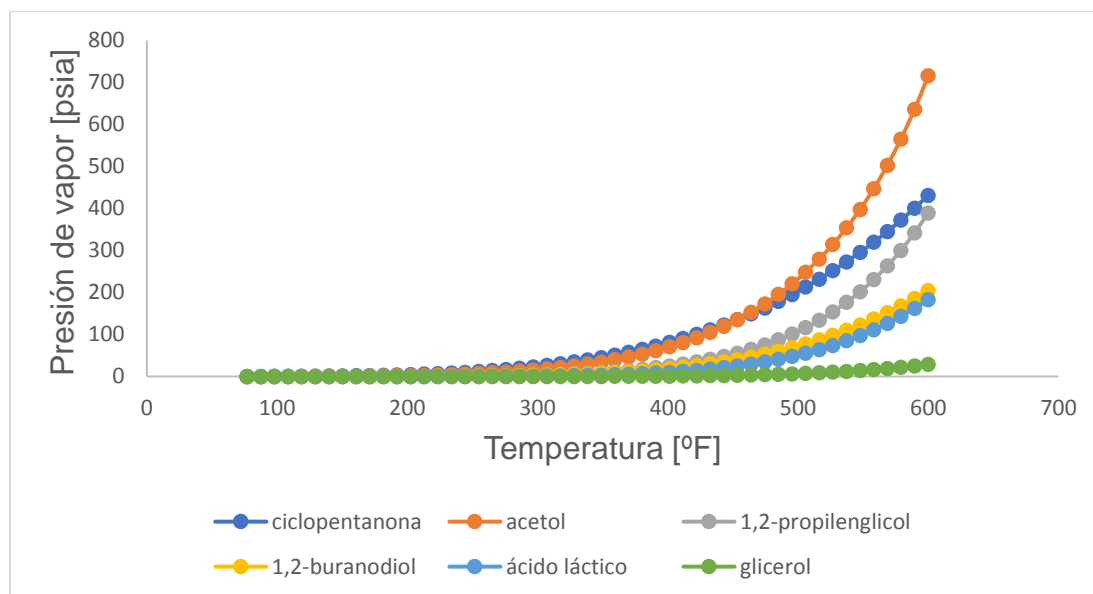
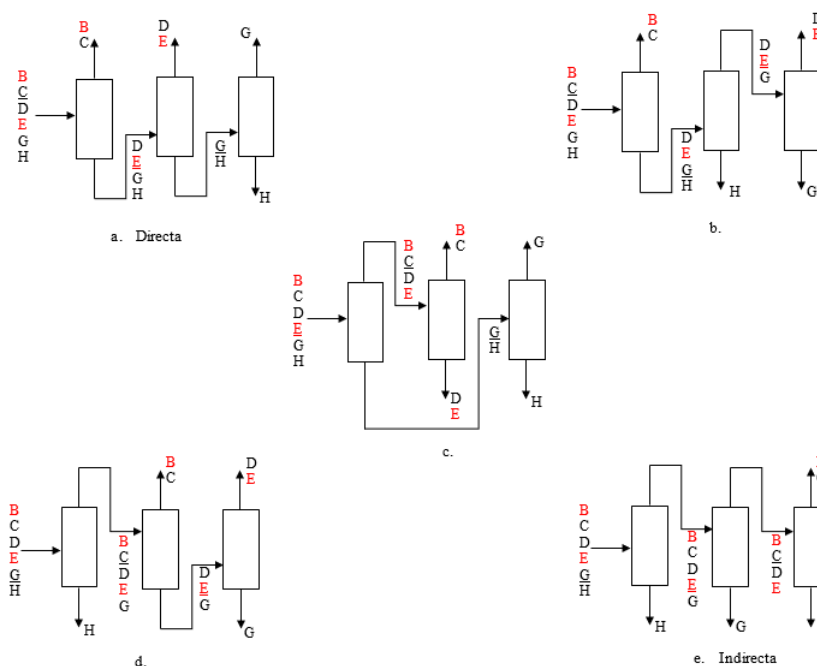


Figura 40

Secuencias de separación para los compuestos orgánicos.



Nota. Los compuestos B y E representan las trazas de ciclopentanona y 1,2 – butanodiol, respectivamente.

4.4.5 Velocidad marginal de vapor

Los resultados del análisis de velocidad marginal de vapor reportados en la Tabla 26 muestran que la secuencia óptima es la directa pues posee el menor valor de MVR.

Según Sinnott (2005) la relación de reflujo R/R_{\min} óptima es aquella que asegura la separación con un costo anual total mínimo, lo cual ocurre con valores entre 1,2 y 1,5. En este estudio se seleccionó 1,5 ya que con este valor se asegura que los costos se reduzcan y se seleccione la secuencia de separación adecuada con un mínimo de MVR.

Tabla 26*Resultados del análisis MVR.*

N.º de Secuencia	Nombre de la Secuencia	Separaciones	Velocidad marginal de vapor (MVR) [lbmol/h]
1	a.	BC/DEGH DE/GH G/H	13,53
2	b.	BC/DEGH DEG/H DE/G	32,02
3	c.	BCDE/GH BC/DE G/H	32,42
4	d.	BCDEG/H BC/DEG DE/G	59,17
5	e.	BCDEG/H BCDE/G BC/DE	117,17

Nota. a: Secuencia directa. e: Secuencia indirecta.

4.4.6 Datos columnas Shortcut

Los datos para el diseño de las columnas de destilación se obtuvieron de la simulación de columnas shortcut donde se emplea una relación de reflujo/ reflujo mínimo (z) igual a 1,5. Ghasem (2012) sugiere que z se halla en valores de 1,1 – 1,5. En este caso se eligió el límite superior ya que de esta forma disminuyen el número de platos de la torre y por ende el costo total de la misma. Los parámetros más importantes de este proceso se resumen en la Tabla 27.

Tabla 27*Resultados de las columnas Shortcut.*

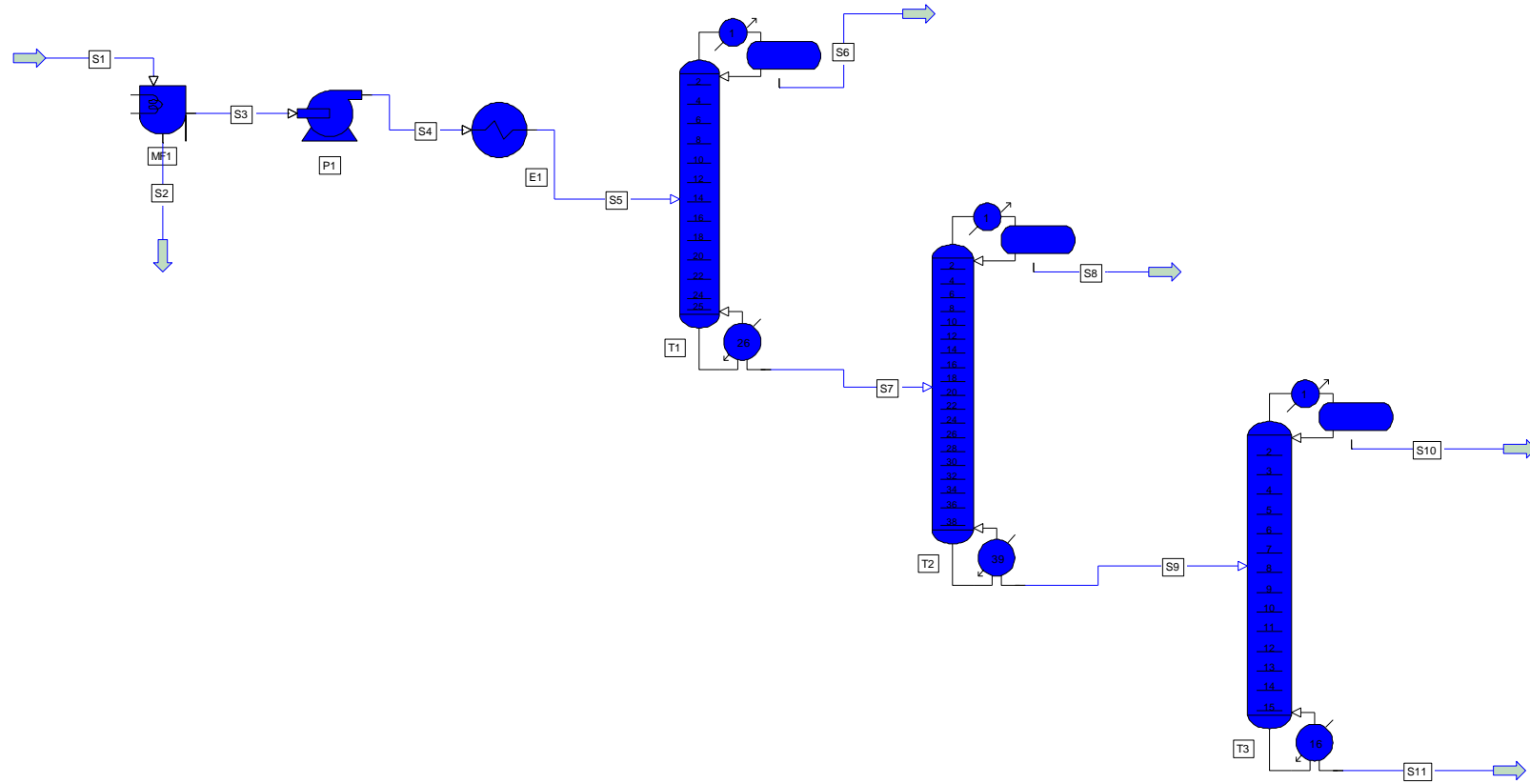
Parámetro	Columna Shortcut 1	Columna Shortcut 2	Columna Shortcut 3
Separación	BC/DEGH	DE/GH	G/H
Presión de alimentación [psia]	35,08	35,08	35,08
Presión del condensador [psia]	30	30	30
Presión del hervidor [psia]	40,16	40,16	40,16
Tipo de condensador	Total	Total	Total
Número de etapas	26	39	16
Etapas de alimentación	12	18	7
Producto Destilado [lbmol/h]	29,69	28,89	21,03
Producto Fondo [lbmol/h]	95,08	66,19	45,16

4.4.7 Secuencia de columnas Distillation

El tren de destilación con columnas de simulación que realizan cálculos rigurosos, llamadas Distillation en PRO II, se muestra en la Figura 41. Aquí además se observa cómo se acopló los equipos usados en la separación del agua y la elevación de presión y temperatura a las columnas.

Figura 41

Segundo sistema de separación.



Los resultados de los flujos molares por especie para cada columna se observan en las Tablas 28 – 30. Estos resultados muestran la recuperación de los componentes una vez optimizada la etapa de alimentación.

Tabla 28

Resultados de la columna de destilación 1 en el segundo sistema de separación.

Compuesto	Flujo Alimentación (S ₅) [lbmol/h]	Flujo Destilado (S ₆) [lbmol/h]	Flujo Fondo (S ₇) [lbmol/h]	Recuperación (S ₆ /S ₅) x 100%
Ciclopentanona	0,12	0,12	3,5E-05	99,97
Acetol	29,59	29,54	0,03	99,90
1,2 – propilenglicol	28,78	0,03	28,76	0,09
1,2 – butanodiol	0,11	7,4E-06	0,11	0,007
Ácido láctico	21,001	3,5E-08	21,001	1,7 E-06
Glicerol	45,18	0	45,18	0

Tabla 29

Resultados de la columna de destilación 2 en el segundo sistema de separación.

Compuesto	Flujo Alimentación (S ₇) [lbmol/h]	Flujo Destilado (S ₈) [lbmol/h]	Flujo Fondo (S ₉) [lbmol/h]	Recuperación (S ₈ /S ₇) x 100%
Ciclopentanona	3,5E-05	3,5E-05	9,8E-16	100
Acetol	0,03	0,03	1,3E-13	100
1,2 – propilenglicol	28,76	28,73	0,03	99,90
1,2 – butanodiol	0,11	0,11	6,4E-05	99,94
Ácido láctico	21,001	0,02	20,98	0,10
Glicerol	45,18	0	45,18	0

Tabla 30

Resultados de la columna de destilación 3 en el segundo sistema de separación.

Compuesto	Flujo Alimentación (S ₉) [lbmol/h]	Flujo Destilado (S ₁₀) [lbmol/h]	Flujo Fondo (S ₁₁) [lbmol/h]	Recuperación (S ₁₀ /S ₉) x 100%
Ciclopentanona	9,8E-16	9,8E-16	1,8E-22	100
Acetol	1,3E-13	1,3E-13	5E-22	100
1,2 – propilenglicol	0,03	0,03	8,25E-08	99,99
1,2 – butanodiol	6,4E-05	6,4E-05	1,5E-10	99,99
Ácido láctico	20,98	20,96	0,02	99,90
Glicerol	45,18	0,05	45,14	0,09

Además, en la Tabla 31 se resumen parámetros importantes extraídos de la simulación de las torres de destilación.

Tabla 31

Datos del segundo tren de destilación.

Parámetro	Columna Distillation 1	Columna Distillation 2	Columna Distillation 3
Flujo molar Destilado [lbmol/h]	29,69	28,89	21,03
Flujo molar Fondo [lbmol/h]	95,089	66,19	45,16
Razón de reflujo	0,71	2,24	0,81
Número de bandejas	26	39	16
Espaciado entre platos [ft]	1	1	1
Diámetro interno [ft]	3	2,5	2,5
Longitud [ft]	28,8	44,4	16,8

4.4.8 Optimización de la etapa de alimentación

Para hallar la bandeja de alimentación que proporciona el requerimiento energético más bajo en el hervidor se aplicaron tres casos de estudio, uno por cada columna. En las Figuras 42 – 44 se observa el comportamiento de la carga energética del hervidor frente a la variación del plato de alimentación.

Figura 42

Optimización de la etapa de alimentación de la columna 1.

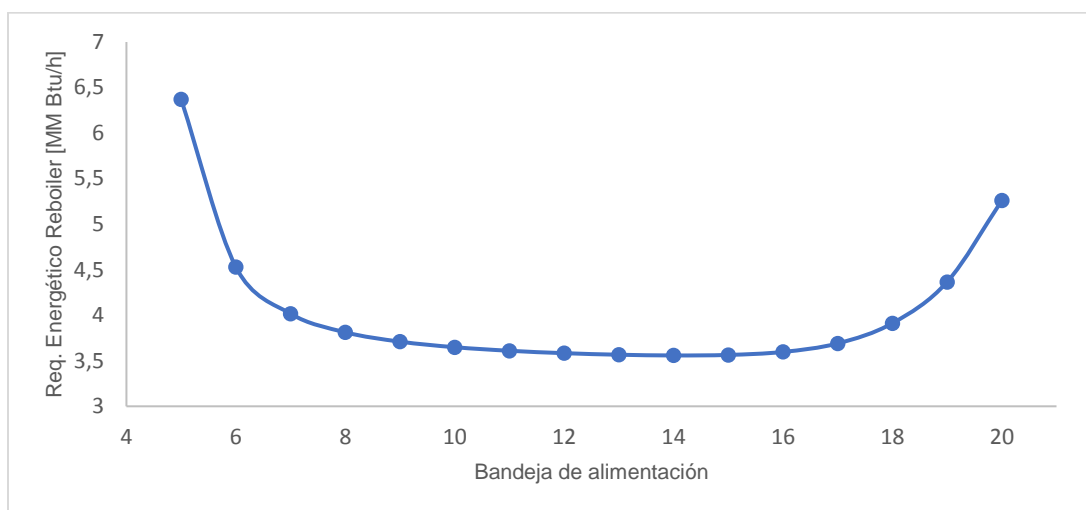


Figura 43

Optimización de la etapa de alimentación de la columna 2.

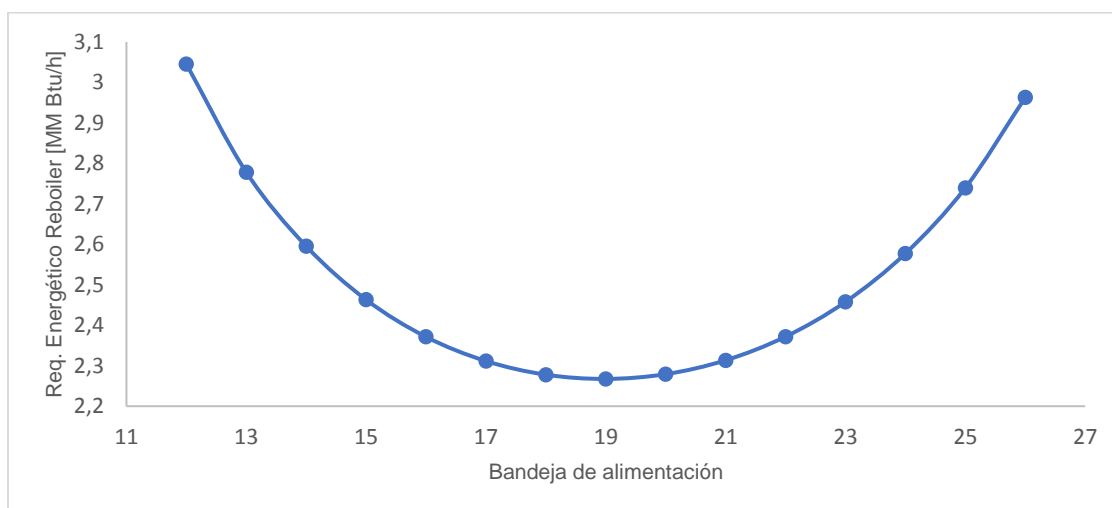
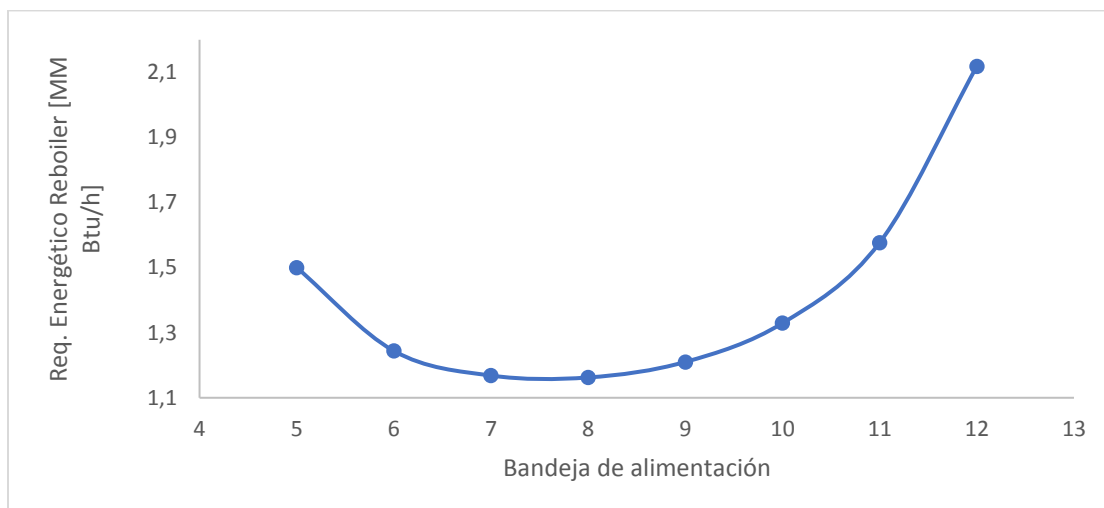


Figura 44

Optimización de la etapa de alimentación de la columna 3.



Los resultados muestran que las etapas de alimentación óptimas de las columnas 1, 2 y 3 son 14, 19 y 8 respectivamente. En la Tabla 32 se muestra una comparación de los parámetros con y sin optimización de la etapa de alimentación, confirmando que la carga calorífica tanto del condensador como del hervidor disminuyen cuando se ajusta el plato de alimentación.

Tabla 32

Comparación de resultados con y sin optimización del plato de alimentación.

C	N.º platos	Sin optimización			Con optimización		
		Feed Stage	Q Hervidor [MM Btu/h]	Q Condensador [MM Btu/h]	Feed Stage	Q Hervidor [MM Btu/h]	Q Condensador [MM Btu/h]
1	26	12	3,58	0,93	14	3,56	0,90
2	39	18	2,28	2,11	19	2,27	2,10
3	16	7	1,17	0,99	8	1,16	0,99

Nota. C significa columna.

4.5 Costos de compra

Como se mostró en la metodología las ecuaciones de los métodos de Mulet et al. (1981a,b) y Corripio et al. (1982a,b) tienen rangos de aplicación específicos. Sin embargo, existen parámetros calculados que no llegan al límite inferior para aplicar las fórmulas de la estimación de costos. En virtud de lo expuesto, cuando el caso lo ameritó los parámetros se aproximaron al menor valor del rango de aplicación. Por tanto, los costos mostrados a continuación están sobredimensionados, lo cual modela satisfactoriamente los recursos económicos necesarios para realizar la compra de equipos.

En el caso de las columnas de destilación se aproximaron a 3 ft los diámetros de las columnas 2 y 3. Para esta última columna se ajustó la longitud a 27 ft y para todas las torres el peso se igualó a 9000 lb. Los resultados se muestran en la Tabla 33.

Tabla 33

Resultados de los costos de las columnas de destilación.

Parámetro	Unidades	Columna 1	Columna 2	Columna 3
Material de la columna	-	acero al carbono	acero al carbono	acero al carbono
Material del plato	-	acero al carbono	acero al carbono	acero al carbono
Diámetro interno	ft	3	3	3
Número de platos	-	26	39	16
Espaciado entre platos	ft	1	1	1
Longitud de la columna	ft	28,8	44,4	27
Peso de la columna	lb	9000	9000	9000
Torre, plataformas y escaleras	\$	72949,67	77445,34	72403,21
Tipo de plato	-	Bandeja perforada	Bandeja perforada	Bandeja perforada
Costo instalación platos	\$	24909,61	37364,41	18022,49
COSTO TOTAL	\$	97859,27	114809,75	90425,71

El área de todos los condensadores, el calentador y el hervidor 3 se aproximaron a 150 ft². Los resultados de los costos de estos equipos se muestran en las Tablas 34 – 36.

Tabla 34

Resultados de los costos de los condensadores.

Parámetro	Unidades	Condensador 1	Condensador 2	Condensador 3
Req. Energético	Btu/h	902880,36	2097582,46	988709,57
Área	ft ²	150	150	150
Tipo H.E.	-	fixed heat	fixed heat	fixed heat
Costo base	\$	7379,30	7379,30	7379,30
Material shell/tube	-	c.steel/c.steel	c.steel/c.steel	c.steel/c.steel
COSTO TOTAL	\$	8965,85	8965,85	8965,85

Tabla 35

Resultados de los costos de los hervidores.

Parámetro	Unidades	Hervidor 1	Hervidor 2	Hervidor 3
Req. Energético	Btu/h	3557652,21	2267625,15	1162360,75
Área	ft ²	296,47	188,97	150
Tipo H.E.	-	kettle	kettle	kettle
Costo base	\$	20482,93	19460,78	19227,10
Material shell/tube	-	c.steel/c.steel	c.steel/c.steel	c.steel/c.steel
COSTO TOTAL	\$	24886,76	23644,84	23360,90

Tabla 36*Resultados de los costos del calentador.*

Parámetro	Unidades	Intercambiador de Calor
Req. Energético	Btu/h	253960,03
Área	ft ²	150
Tipo H.E.	-	fixed head
Costo base	\$	7379,30
Material shell/tube	-	c.steel/c.steel
COSTO TOTAL	\$	8965,85

Por heurística la bomba se define como una bomba axial. Sin embargo, considerando las especificaciones del método de Corripio et al. (1982a) los costos se estiman para una bomba centrífuga y un motor eléctrico con una carcasa abierta a prueba de goteo. La selección de una bomba centrífuga se fundamenta además en que este tipo de bomba se selecciona para servicio industrial aproximadamente el 90% del tiempo y es relativamente económica tanto en el costo de compra como en la manutención (Seider et al., 2009). De igual forma, el motor de carcasa abierta a prueba de agua se elige considerando que los costos de capital de compra y de mantenimiento son menores en comparación con las otras carcasas (Holmquist et al., 2005).

El flujo volumétrico y factor de tamaño (S) se definieron con valores de 50 gpm y 400 gpm(ft^{0.5}) respectivamente para el cálculo de los costos de la bomba, reportados en la Tabla 37.

Tabla 37*Resultados de los costos de la bomba.*

Parámetro	Unidades	BOMBA
Tipo	-	centrífuga
carga bomba	ft	40,06
Flujo volumétrico	gpm	50
Factor de tamaño, S	gpm(ft ^{0.5})	400
Número de etapas	-	2
rpm del eje	rpm	3600
Orientación Case-split	-	HSC
Material de construcción		cast steel
Costo bomba sin motor	\$	12861,91
Tipo de motor	-	explosion proof
Costo motor eléctrico	\$	805,54
COSTO TOTAL	\$	13667,45

Los costos del equipo Melter/ Frezzer se estiman considerándolo como un cristalizador del tipo “draft-tube baffled”. Este tipo de cristalizador actúa como cristalizador evaporativo y es empleado para cristalización en solución y no para cristalización por enfriamiento, sin embargo, en la literatura no se ha reportado un método para la estimación de costos para equipos de cristalización por enfriamiento (Seider et al., 2009).

Al considerar el Melter/ Frezzer como un cristalizador draft-tube baffled, el costo de compra del equipo presenta un error, pero su elección permitió aproximar el costo del cristalizador. Al igual que para los demás equipos, la ecuación de estimación de costos del cristalizador tiene rangos de aplicación específicos, como se mostró en la metodología. Para este equipo específicamente la producción de cristales (W) fue igual

a 956,12 ton/día, lo cual superó el límite superior (250 ton/día) de la fórmula del costo de compra. Entonces los cálculos del costo del cristalizador se ajustaron calculando el costo de compra para dos valores diferentes de producción de cristales (W_1 y W_2). El costo del cristalizador con $W_1= 250$ ton/día se multiplicó por tres y se sumó el precio del otro cristalizador con $W_2= 206,12$ ton/día, de forma que al final la suma de ambos estima el costo para un solo cristalizador con $W= 956,12$ ton/día. Así, los resultados de los costos del cristalizador se muestran en la Tabla 38.

Tabla 38

Resultados de los costos del cristalizador.

Parámetro	Unidades	Cristalizador draft-tube baffled
Producción de cristales total (W)	ton/día	956,12
Producción de cristales 1 (W_1)	ton/día	250
Producción de cristales 2 (W_2)	ton/día	206,12
Costo con W_1	\$	1110523,09
Costo con W_2	\$	983389,54
COSTO TOTAL	\$	4314958,80

La diferencia entre los costos de los trenes es muy significativa pues el costo de los equipos del primer sistema de separación es \$ 848942,82 mientras que del segundo sistema de separación es \$ 4739476,90; que es de aproximadamente una razón de 1 a 6. Por tanto, el primer sistema de separación es favorecido desde un punto de vista económico.

Capítulo V

Conclusiones y recomendaciones

5.1 Conclusiones

La separación de especies químicas del reformado de glicerol mediante la simulación en el software PRO II se realizó planteando dos configuraciones diferentes del sistema de separación. Para ambos casos la recuperación de los productos fue de aproximadamente el 99,9% y no todos los compuestos se obtuvieron de forma individual, algunos se obtuvieron como mezcla de productos. Los productos en mezcla fueron agua con trazas de ciclopentanona para el primer sistema, trazas de ciclopentanona con acetol para el segundo sistema de separación y 1,2 – propilenglicol con trazas de 1,2 – butanodiol para ambos sistemas de separación.

Para los dos sistemas de separación la mezcla resulto ser ideal. En el primer sistema de separación se evidenció que en el diagrama x – y existe un cruce de la curva de equilibrio con la recta a 45° por lo cual se dice que la mezcla binaria agua – ciclopentanona forman un azeótropo, a lo cual no se le dio mayor importancia ya que la ciclopentanona en la solución es una traza. En el caso del segundo sistema para la mezcla 1,2 – propilenglicol – glicerol existió una desviación en los coeficientes de actividad, sin embargo, la desviación fue extremadamente pequeña.

Para la aplicación del método de velocidad marginal de vapor primero se ordenaron los productos en forma descendente según su volatilidad. En este punto además se verificó el orden de volatilidades en un rango de temperatura en el que operaron las columnas de destilación comprobando que existe un intercambio en el orden de la ciclopentanona y el acetol a partir de los 450 °F. Este cambio no representó ningún inconveniente en ninguno de los sistemas de separación ya que las torres en las que estos compuestos son separados operan a temperaturas más bajas 450 °F. El resultado de la velocidad marginal de vapor señaló que la secuencia directa es la más adecuada en los dos sistemas con valores iguales a 923,17 lbmol/h para el primero y 13,53 lbmol/h para el segundo.

La simulación de la separación de 7 especies químicas procedentes del reformado de glicerol se realizó diseñando dos sistemas de separación. El primer sistema corresponde a un tren de cuatro columnas destilación en secuencia directa que separa cinco productos (1. Agua con trazas de ciclopentanona, 2. acetol, 3. 1,2 – propilenglicol con trazas de 1,2 – butanodiol, 4. ácido láctico y 5. glicerol). Y el segundo emplea en primer lugar la separación del agua de los productos orgánicos por cristalización por enfriamiento seguido de una bomba y un intercambiador de calor para elevar la presión y temperatura y finalmente un tren de destilación para cuatro productos (1. trazas de ciclopentanona con acetol, 2. 1,2 – propilenglicol con trazas de 1,2 – butanodiol, 3. ácido láctico y 4. glicerol) en tres torres.

Los costos de las columnas se evaluaron considerando el costo total de la torre, los componentes correspondientes y además el costo del condensador y el hervidor en ambos sistemas de separación. Para el segundo sistema se calcularon además los costos para una bomba, un intercambiador de calor y un cristizador. El costo del cristizador fue calculado como un cristizador evaporativo tipo draft-tube baffled, porque no existen métodos en la literatura para la estimación de costos para equipos empleados en cristalización por enfriamiento, por lo que el cálculo presenta un error, pero permite aproximar el precio de compra del equipo. El número total de equipos en ambos sistemas de separación fue de 12, el primer sistema se forma con 4 columnas, 4 condensadores y 4 hervidores cuyo costo fue de \$ 848942,82, mientras que para el segundo emplea 3 columnas, 3 condensadores, 3 hervidores, 1 bomba y 1 intercambiador de calor y 1 Melter/Freezer (cristizador) con un costo de \$ 4739476,90, lo cual se atribuye a la alta tasa de producción de cristales requerida.

La evaluación de los costos de compra de los equipos refleja que el diseño de un sistema de separación con cuatro columnas de destilación en secuencia directa resulta más económico que si se elimina previamente el agua de la solución. La diferencia de los costos entre los sistemas de separación fue de \$ 3890534,08, lo que representa una reducción del precio del 82,09% a favor del tren que separa agua usando una columna de destilación.

5.2 Recomendaciones

Estudiar exhaustivamente todas las propiedades físicas de los compuestos químicos a separar para la determinación de comportamientos de cada sustancia y explorar otras operaciones unitarias para la separación.

Investigar la cinética de reacción del reformado de glicerol en fase acuosa para la obtención de agua, ciclopentanona, acetol, 1,2 – propilenglicol, 1,2 – butanodiol, ácido láctico y glicerol como productos líquidos e implementar en la simulación un reactor donde se lleve a cabo el reformado de glicerol.

Realizar la simulación de la separación de especies química provenientes de la corriente de productos líquidos del reformado de glicerol usando un software de simulación que contenga todos los compuestos químicos a separar en su base de datos.

Añadir en la simulación la separación de trazas de ciclopentanona y 1,2 – butanodiol por cristalización en estado fundido usando un melter/freezer.

Incluir cálculos del costo de las utilidades de enfriamiento y calentamiento para complementar el análisis y estimación de costos de los sistemas de separación.

Realizar la integración de calor de los intercambiadores de calor (condensador y hervidor) de las columnas de destilación para determinar los requerimientos mínimos energéticos y reducir los costos del sistema de separación.

Bibliografía

- Aida, T. M., Ikarashi, A., Saito, Y., Watanabe, M., Smith Jr, R. L., & Arai, K. (2009). Dehydration of lactic acid to acrylic acid in high temperature water at high pressures. Recuperado el 11 de enero del 2021. *The Journal of Supercritical Fluids*, 50(3), 257–264. <https://doi.org/10.1016/j.supflu.2009.06.006>
- Al Shalabi, E. W., & Sepehrnoori, K. (2017). *Low salinity and engineered water injection for sandstone and carbonate reservoirs*. ELSEVIER.
- Albright, L. F. (2009). *Albright's chemical engineering handbook*. CRC Press.
- Alén, R. (2018). *Carbohydrate chemistry: fundamentals and applications*. World Scientific Publishing Company.
- Apponi, A. J., Hoy, J. J., Halfen, D. T., & Ziurys, L. M. (2006). Hydroxyacetone (CH₃COCH₂OH): A combined microwave and millimeter-wave laboratory study and associated astronomical search. Recuperado el 01 de abril del 2021. *The Astrophysical Journal*, 652(2), 1787–1795. <https://doi.org/10.1086/508157>
- Auras, R., Lim, L.-T., Selke, S. E. M., & Tsuji, H. (2010). *Poly(lactic acid) synthesis, structures, properties, processing, and applications*. John Wiley & Sons Inc.
- Barrera, R., Villa, A. L., & Montes de Correa, C. (2012). Modeling and simulation of a batch distillation column for recovering limonene epoxide. *Revista EIA*, 18, 131–141.
- Biyanto, T. R., Rahman, J. A., Sarwono, Roekmono, NurLaila, H., Abdurrakhman, A., & Darwito, P. A. (2017). Techno economic optimization of Petlyuk distillation column design using duelist algorithm. Recuperado el 01 de abril del 2021. *Procedia Engineering*, 170, 520–527. <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2017.03.083>
- Carranza, A., & González, R. (2020). A Petlyuk distillation column dynamic analysis: Hysteresis and bifurcations. Recuperado el 01 de abril del 2021. *Chemical Engineering and Processing - Process Intensification*, 149, 107843. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2020.107843>
- Castillo, F., Balciunas, E., Salgado, J., Domínguez, J., Converti, A., & de Souza, R.

- (2013). Lactic acid properties, applications and production: A review. Recuperado el 31 de marzo del 2021. *Trends in Food Science & Technology*, 30(1), 70–83. <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2012.11.007>
- Castrellón, T., Botía, D. C., Gómez, R., Orozco, G., & Gil, I. D. (2011). Using process simulators in the study, design, and control of distillation columns for undergraduate chemical engineering courses. Recuperado el 25 de marzo del 2021. *Computer Applications in Engineering Education*, 19(3), 621–630. <https://doi.org/10.1002/cae.20345>
- Coker, A. K. (2010). *Ludwig's applied process design for chemical and petrochemical plants* (4th ed.). Gulf Professional Publishing.
- Corripio, A. B., Chrien, K. S., & Evans, L. B. (1982a). Estimate costs of centrifugal pumps and electric motors. *Chem. Eng.*, 89, 115–118.
- Corripio, A. B., Chrien, K. S., & Evans, L. B. (1982b). Estimate costs of heat exchangers and storage tanks via correlations. *Chem. Eng.*, 89, 125–127.
- Couper, J. R., Penney, W. R., Fair, J. R., & Walas, S. M. (2012). *Chemical process equipment. Selection and design* (3rd ed.). Butterworth-Heinemann.
- Di Lorenzo, M. L., & Androsch, R. (2018). *Synthesis, structure and properties of poly(lactic acid)*. Springer International Publishing AG.
- Dib, G. El, Azaad, B., Lakshmi pathi, S., Laversin, H., Roth, E., & Chakir, A. (2018). An experimental and theoretical study on the kinetics of the reaction between 4-hydroxy-3-hexanone $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(\text{O})\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_2\text{CH}_3$ and OH radicals. Recuperado el 02 de abril del 2021. *International Journal of Chemical Kinetics*, 50(8), 556–567. <https://doi.org/10.1002/kin.21181>
- Dimian, A., Bildea, C., & Kiss, A. (2014). *Integrated design and simulation of chemical processes* (2nd ed.). ELSEVIER.
- Dutta, B. K. (2007). *Principles of mass transfer and separation processes*. PHI Learning Private Limited.
- Esposito, D., & Antonietti, M. (2013). Chemical conversion of sugars to lactic acid by alkaline hydrothermal processes. Recuperado el 10 de marzo del 2021. *ChemSusChem*, 6(6), 989–992. <https://doi.org/10.1002/cssc.201300092>

- Foo, D., Chemmangattuvalappil, N., Ng, D. K. S., Elyas, R., Chen, C.-L., Elms, R. D., Lee, H.-Y., Chien, I.-L., Chong, S., & Chong, C. H. (2017). *Chemical engineering process simulation*. ELSEVIER.
- Gabelman, A. (2017). Adsorption basics: part 1. *Chemical Engineering Progress*, 113(7), 48–53.
- Geankoplis, C. J. (1998). *Procesos de transporte y operaciones unitarias* (3rd ed.). CONTINENTAL, S.A. DE C.V.
- Ghasem, N. (2012). *Computer methods in chemical engineering*. CRC Press.
- Górak, A., & Schoenmakers, H. (2014). *Distillation: operation and applications*. Academic Press.
- Hall, S. M. (2011). *Rules of thumb for chemical engineers* (4th ed.). ELSEVIER.
- Hall, S. M. (2018). *Rules of thumb for chemical engineers* (6th ed.). ELSEVIER.
- Holmquist, J. R., Rayner, N. H., & Rooks, J. A. (2005). Sealed insulation systems for electric motors. Recuperado el 03 de abril del 2021. *Conference Record of 2005 Annual Pulp and Paper Industry Technical Conference*, 29–42.
<https://doi.org/10.1109/PAPCON.2005.1502047>
- Jenkins, S. (2020). *2019 Chemical engineering plant cost index annual average*. Recuperado el 15 de diciembre del 2020. <https://www.chemengonline.com/2019-chemical-engineering-plant-cost-index-annual-average/>
- Jiménez, Alfonso, Peltzer, M., & Ruseckaite, R. (2015). *Poly(lactic acid) science and technology processing, properties, additives and applications*. Royal Society of Chemistry.
- Jiménez, Arturo. (2003). *Diseño de procesos en ingeniería química*. Reverté S.A.
- King, C. J. (2013). *Separation Processes* (2nd ed.). Dover Publications Inc.
- King, D. L., Zhang, L., Xia, G., Karim, A. M., Heldebrant, D. J., Wang, X., Peterson, T., & Wang, Y. (2010). Aqueous phase reforming of glycerol for hydrogen production over Pt–Re supported on carbon. Recuperado el 03 de noviembre del 2020. *Applied Catalysis B: Environmental*, 99(1–2), 206–213.
<https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2010.06.021>

- Kirk -Othmer. (2007). *Encyclopedia of chemical technology* (5th ed.). John Wiley & Sons, Inc.
- Kiss, A. A. (2013). *Advanced distillation technologies design, control and applications*. John Wiley & Sons, Inc.
- Kleiber, M. (2020). *Process Engineering* (2nd ed.). Walter de Gruyter GmbH.
- Lei, Z., Chen, B., & Ding, Z. (2005). *Special distillation processes*. ELSEVIER.
- Levine, I. N. (2004). *Fisicoquímica volumen 1* (5th ed.). McGraw-Hill.
- Liu, X., Liu, X., Xu, G., Zhang, Y., Wang, C., Lu, Q., & Ma, L. (2019). Highly efficient catalytic conversion of cellulose into acetol over Ni–Sn supported on nanosilica and the mechanism study. Recuperado el 02 de abril del 2021. *Green Chemistry*, 21(20), 5647–5656. <https://doi.org/10.1039/C9GC02449B>
- Luyben, W. L. (2013). *Distillation design and control using Aspen™ simulation*. John Wiley & Sons, Inc.
- Mäki-Arvela, P., Simakova, I. L., Salmi, T., & Murzin, D. Y. (2014). Production of lactic acid/lactates from biomass and their catalytic transformations to commodities. Recuperado el 10 de marzo del 2021. *Chemical Reviews*, 114(3), 1909–1971. <https://doi.org/10.1021/cr400203v>
- Mejía, C. (2012). *Diseño de una columna de destilación a vacío para separar biodiesel (FAME's) con vistas a la producción de bioqueroseno para aviación*. Recuperado el 28 de marzo del 2021 [Trabajo Fin de Máster, Universidad de Zaragoza]. <https://zaguan.unizar.es/record/9867?ln=es#>
- Modi, A. K., & Westerberg, A. W. (1992). Distillation column sequencing using marginal price. Recuperado el 11 de marzo del 2021. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 31(3), 839–848. <https://doi.org/10.1021/ie00003a028>
- Mulet, A., Corripio, A. B., & Evans, L. B. (1981a). Estimate costs of distillation and absorption towers via correlations. *Chem. Eng.*, 88(26), 77–82.
- Mulet, A., Corripio, A. B., & Evans, L. B. (1981b). Estimate costs of pressure vessels via correlations. *Chem. Eng.*, 88(20), 145–150.
- Myerson, A. S., Erdemir, D., & Lee, A. Y. (2019). *Handbook of industrial crystallization*

- (3rd ed.). Cambridge University Press.
- Okoli, C. O., & Adams II, T. A. (2015). Design of dividing wall columns for butanol recovery in a thermochemical biomass to butanol process. Recuperado el 25 de marzo del 2021. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 95, 302–316. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2015.07.002>
- Pagliari, M. (2017). *Glycerol: the renewable platform chemical*. ELSEVIER.
- Pagliari, M., & Rossi, M. (2010). *The future of glycerol* (2nd ed.). Royal Society of Chemistry.
- Petlyuk, F. B. (2004). *Distillation theory and its application to optimal design of separation units*. Cambridge University Press.
- Pilling, M., & Holden, B. S. (2009). Choosing trays and packings for distillation. *American Institute of Chemical Engineers*, 105, 44–50.
- Ponce, J. M., & Hernández, L. G. (2019). *Optimization of process flowsheets through metaheuristic techniques*. Springer International Publishing AG.
- Ren, D., Song, Z., Li, L., Liu, Y., Jin, F., & Huo, Z. (2016). Production of 2,5-hexanedione and 3-methyl-2-cyclopenten-1-one from 5-hydroxymethylfurfural. Recuperado el 01 de abril del 2021. *Green Chemistry*, 18(10), 3075–3081. <https://doi.org/10.1039/C5GC02493E>
- Roylance, J. J., & Choi, K.-S. (2016). Electrochemical reductive biomass conversion: direct conversion of 5-hydroxymethylfurfural (HMF) to 2,5-hexanedione (HD) via reductive ring-opening. Recuperado el 02 de abril del 2021. *Green Chemistry*, 18(10), 2956–2960. <https://doi.org/10.1039/C6GC00533K>
- Sahoo, T. (2013). *Process plants shutdown and turnaround management*. CRC Press.
- Seader, J. D., Henley, E. J., & Roper, D. K. (2010). *Separation process principles chemical and biochemical operations* (3rd ed.). John Wiley & Sons, Inc.
- Seider, W. D., Seader, J. D., Lewin, D. R., & Widagdo, S. (2009). *Product and process design principles synthesis, analysis, and evaluation* (3rd ed.). John Wiley & Sons, Inc.
- Shabani, M. R., & Yekta, R. B. (2006). Suitable method for capital cost estimation in

- chemical processes industries. *Cost Engineering*, 48(5), 22–25.
- Shah, R. K., & Sekulic, D. P. (2003). *Fundamentals of heat exchanger design*. John Wiley & Sons, Inc.
- Sinnott, R. K. (2005). *Coulson & Richardson's chemical engineering, volume 6, chemical engineering design* (4th ed.). Elsevier Butterworth-Heinemann.
- Smejkal, Q., & Šoóš, M. (2002). Comparison of computer simulation of reactive distillation using aspen plus and hysys software. Recuperado el 25 de marzo del 2021. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 41(5), 413–418. [https://doi.org/10.1016/S0255-2701\(01\)00160-X](https://doi.org/10.1016/S0255-2701(01)00160-X)
- Smith, C. L. (2012). *Distillation control: an engineering perspective*. John Wiley & Sons, Inc.
- Smith, R. (2005). *Chemical process design and integration*. John Wiley & Sons Inc.
- Sundmacher, K., & Kienle, A. (2006). *Reactive distillation: status and future directions*. John Wiley & Sons, Inc.
- Tan, H. W., Aziz, A. R. A., & Aroua, M. K. (2013). Glycerol production and its applications as a raw material: A review. Recuperado el 04 de febrero del 2021. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 27, 118–127. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2013.06.035>
- Treybal, R. E. (2000). *Operaciones de transferencia de masa* (2nd ed.). McGraw-Hill.
- Tung, H.-H., Paul, E. L., Midler, M., & McCauley, J. A. (2009). *Crystallization of organic compounds an industrial perspective*. John Wiley & Sons, Inc.
- Tututi, S., Domínguez, L. A., Medina, N., Jiménez, A., & Hahn, J. (2017). Dividing-wall columns: Design and control of a kaibel and a satellite distillation column for BTX separation. Recuperado el 31 de marzo del 2021. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 114, 1–15. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2017.01.010>
- Tuza, P. V., Manfro, R. L., Ribeiro, N. F. P., & Souza, M. M. V. M. (2013). Production of renewable hydrogen by aqueous-phase reforming of glycerol over Ni-Cu catalysts derived from hydrotalcite precursors. Recuperado el 12 de enero del 2021.

- Renewable Energy*, 50, 408–414. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2012.07.006>
- Ullmann, F. (2011). *Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry* (7th ed.). Wiley-VCH.
- Van Krieken, J. (2007). *Método para la purificación de ácido láctico a escala industrial*. (Patent No. ES2283440T3). OFICINA ESPAÑOLA DE PATENTES Y MARCAS.
- Vazquez, V., & Moreira, E. (2019). Ni/CaO-SiO₂ catalysts for assessment in steam reforming reaction of acetol. Recuperado el 02 de abril del 2021. *Fuel*, 254, 115592. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.05.175>
- Wadley, D. C., Tam, M. S., Kokitkar, P. B., Jackson, J. E., & Miller, D. J. (1997). Lactic acid conversion to 2,3-pentanedione and acrylic acid over silica-supported sodium nitrate: reaction optimization and identification of sodium lactate as the active catalyst. Recuperado el 13 de enero del 2021. *JOURNAL OF CATALYSIS*, 165(2), 162–171. <https://doi.org/10.1006/jcat.1997.1484>
- Wan, Y., Zhuang, M., Chen, S., Hu, W., Sun, J., Lin, J., Wan, S., & Wang, Y. (2017). One-pot production of lactic acid from acetol over dealuminated tin beta supported gold catalyst. Recuperado el 07 de enero del 2021. *ACS Catalysis*, 7(9), 6038–6047. <https://doi.org/10.1021/acscatal.7b01499>
- Wang, L., Zhou, S., Shi, M., Jia, B., Liu, H., & Li, Q. (2018). Liquid–liquid extraction of cyclopentanone from aqueous solution with methylcyclohexane or propyl acetate at different temperatures. Recuperado el 25 de noviembre del 2020. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 63(8), 2653–2659. <https://doi.org/10.1021/acs.jced.7b01109>
- Wang, T., Li, X., & Dong, J. (2020). Ethylene glycol purification by melt crystallization: Removal of short-chain glycol impurities. Recuperado el 30 de noviembre del 2020. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 59(18), 8805–8812. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.0c00347>
- Wawrzetz, A., Peng, B., Hrabar, A., Jentys, A., Lemonidou, A. A., & Lercher, J. A. (2010). Towards understanding the bifunctional hydrodeoxygenation and aqueous phase reforming of glycerol. Recuperado el 25 de marzo del 2021. *Journal of Catalysis*, 269(2), 411–420. <https://doi.org/10.1016/j.jcat.2009.11.027>
- Xiaobo, X., Jianping, L., & Peilin, C. (2006). Advances in the research and development

of acrylic acid production from biomass. Recuperado el 27 de marzo del 2021. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 14(4), 419–427. [https://doi.org/10.1016/S1004-9541\(06\)60094-3](https://doi.org/10.1016/S1004-9541(06)60094-3)

Yin, C., & Liu, G. (2019). Automatic identification of the optimal distillation sequence based on its integration with reactor. Recuperado el 25 de marzo del 2021. *Chemical Engineering Science*, 207(2), 424–440. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2019.06.021>

Zhang, N., Bai, F., & Pan, X. (2019). Theoretical investigation of the mechanism, kinetics and subsequent degradation products of the NO₃ radical initiated oxidation of 4-hydroxy-3-hexanone. Recuperado el 02 de abril del 2021. *Environmental Science: Processes & Impacts*, 21(12), 2080–2092. <https://doi.org/10.1039/C9EM00358D>

Anexos