



## **Productos químicos para procesos de destilación obtenidos mediante computador**

Zumba Sisalima, Betzy Mishel

Departamento de Ciencias de la Energía y Mecánica

Carrera de Petroquímica

Trabajo de integración curricular, previo a la obtención del título de Ingeniero en Petroquímica

Robalino Cacuango, Milton Javier, M. Sc.

15 de agosto de 2022

Latacunga



UIC\_Final\_Zumba\_Sisalima\_Betzy\_Mishel.pdf

Scanned on: 19:26 August 15, 2022 UTC



Overall Similarity Score



Results Found



Total Words in Text

Identical Words	178
Words with Minor Changes	0
Paraphrased Words	0
Omitted Words	2073



Escanea el código QR para:  
MILTON JAVIER  
ROBALINO  
CACUANGO

.....

**Robalino Cacuango, Milton Javier, M. Sc.**

C.C.: 1724579345



**Departamento de Ciencias de la Energía y Mecánica**

**Carrera de Petroquímica**

**Certificación**

Certifico que el trabajo de integración curricular: **“Productos químicos para procesos de destilación obtenidos mediante computador”** fue realizado por la señorita **Zumba Sisalima, Betzy Mishel**, el mismo que cumple con los requisitos legales, teóricos, científicos, técnicos y metodológicos establecidos por la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE, además fue revisado y analizado en su totalidad por la herramienta de prevención y/o verificación de similitud de contenidos; razón por la cual me permito acreditar y autorizar para que lo sustente públicamente.

Latacunga, 15 de agosto del 2022



Firmado electrónicamente por:  
**MILTON JAVIER  
ROBALINO  
CACUANGO**

---

**Robalino Cacuango, Milton Javier, M. Sc.**

C.C.: 1724579345



**Departamento de Ciencias de la Energía y Mecánica**

**Carrera de Petroquímica**

**Responsabilidad de Autoría**

Yo, **Zumba Sisalima, Betzy Mishel**, con cédula de ciudadanía n° **1718525445**, declaro que el contenido, ideas y criterios del trabajo de integración curricular: **“Productos químicos para procesos de destilación obtenidos mediante computador”**, 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, 15 de agosto del 2022



---

**Zumba Sisalima, Betzy Mishel**

C.C.: 1718525445



**Departamento de Ciencias de la Energía y Mecánica**

**Carrera de Petroquímica**

**Autorización de Publicación**

Yo, **Zumba Sisalima, Betzy Mishel**, con cédula de ciudadanía n° **1718525445**, autorizo a la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE publicar el trabajo de integración curricular: **“Productos químicos para procesos de destilación obtenidos mediante computador”**, en el Repositorio Institucional, cuyo contenido, ideas y criterios son de mi responsabilidad.

Latacunga, 15 de agosto del 2022

---

**Zumba Sisalima, Betzy Mishel**

C.C.: 1718525445

## **Dedicatoria**

A Dios, a mis padres y hermano.

## **Agradecimiento**

A mis queridos padres Emilio Zumba y Magdalena Sisalima por su amor, sacrificio y apoyo incondicional. Por encaminarme por el buen sendero y motivarme constantemente para alcanzar mis metas.

A mis amigos con quienes compartí momentos inolvidables durante todo este trayecto, siempre serán una parte importante en mi vida.

A Diego por estar ahí presente siempre, por brindarme su ayuda, amor y aliento.

A Belén, Jessica, Esther y Vanesa quienes se convirtieron en mi familia universitaria.

Al Dr. Pablo Tuza y al Ing. Milton Robalino por su guía en el desarrollo y conclusión de mi trabajo de titulación.

**ÍNDICE DE CONTENIDO**

<b>Carátula .....</b>	<b>1</b>
<b>Reporte de verificación de contenidos.....</b>	<b>2</b>
<b>Certificación .....</b>	<b>3</b>
<b>Responsabilidad de Autoría.....</b>	<b>4</b>
<b>Autorización de Publicación .....</b>	<b>5</b>
<b>Dedicatoria .....</b>	<b>6</b>
<b>Agradecimiento.....</b>	<b>7</b>
<b>Índice de contenido .....</b>	<b>8</b>
<b>Índice de tablas .....</b>	<b>12</b>
<b>Índice de figuras .....</b>	<b>13</b>
<b>Resumen.....</b>	<b>14</b>
<b>Abstract .....</b>	<b>15</b>
<b>Capítulo I: Introducción.....</b>	<b>16</b>
<b>Antecedentes.....</b>	<b>16</b>
<b>Planteamiento del problema.....</b>	<b>18</b>
<b>Justificación e importancia .....</b>	<b>19</b>
<b>Objetivos.....</b>	<b>20</b>
<b><i>Objetivo General</i> .....</b>	<b>20</b>
<b><i>Objetivos específicos</i> .....</b>	<b>20</b>
<b>Hipótesis .....</b>	<b>20</b>
<b>Variables de investigación.....</b>	<b>21</b>



<i>Variable dependiente</i> .....	21
<i>Variable independiente</i> .....	21
<b>Capítulo II: Fundamentación teórica</b> .....	<b>22</b>
<b>Marco de desarrollo de productos</b> .....	<b>22</b>
<b>SGPDP</b> .....	<b>22</b>
<b>SGTDP</b> .....	<b>23</b>
<b>Mapa de innovación</b> .....	<b>23</b>
<b>Productos químicos básicos</b> .....	<b>24</b>
<i>n-Butano</i> .....	25
<i>trans-2-Buteno</i> .....	25
<i>Furfural</i> .....	26
<i>1,4-Butanodiol</i> .....	26
<i>Etilenglicol</i> .....	27
<i>Glicerol</i> .....	27
<i>1,2-Propilenglicol</i> .....	28
<b>Agente separador de masa o MSA (Mass Separation Agent)</b> .....	<b>28</b>
<b>Criterios para elegir un agente separador de masa</b> .....	<b>29</b>
<b>Factor de separación</b> .....	<b>29</b>
<i>Volatilidad relativa</i> .....	30
<b>Destilación</b> .....	<b>30</b>
<i>Destilación azeotrópica</i> .....	31

	10
<i>Destilación extractiva</i> .....	32
Columna de destilación .....	33
<i>Número de platos</i> .....	33
<i>Número mínimo de platos</i> .....	34
<i>Número infinito de platos</i> .....	34
<i>Razón de reflujo</i> .....	34
<i>Reflujo</i> .....	35
Toxicidad de una especie química .....	35
<i>Método de contribución de grupos</i> .....	35
Inflamabilidad de una especie química.....	36
<i>Índice F</i> .....	37
Costo de compra de una especie química.....	37
Software AVEVA PRO/IITM .....	38
<i>Paquetes termodinámicos</i> .....	38
<i>SRK</i> .....	39
Capítulo III: Marco metodológico.....	40
Introducción.....	40
Extracción de datos .....	40
Factor de Separación .....	45
Toxicidad e inflamabilidad.....	46
<i>Método de contribución de grupos</i> .....	46

<i>Índice F</i> .....	47
<b>Determinación del número de platos, razón de reflujo, calor en el rehervidor y reflujo</b> .....	50
<i>Secuencias de separación</i> .....	50
<i>Selección de la presión y el tipo de condensador</i> .....	50
<i>Reflujo</i> .....	52
<b>Costo de las especies químicas</b> .....	54
<b>Secuencia de destilación extractiva</b> .....	54
<b>Capítulo IV: Análisis y discusión de resultados</b> .....	56
<b>Introducción</b> .....	56
<b>Extracción de datos</b> .....	56
<b>Factor de Separación</b> .....	62
<b>Toxicidad e inflamabilidad</b> .....	66
<b>Número de platos, razón de reflujo, calor en el rehervidor y reflujo</b> .....	67
<b>Costos de las especies químicas</b> .....	72
<b>Simulación de la destilación extractiva en PRO/II</b> .....	73
<b>Capítulo V: Conclusiones y recomendaciones</b> .....	75
<b>Conclusiones</b> .....	75
<b>Recomendaciones</b> .....	76
<b>Bibliografía</b> .....	77
<b>Anexos</b> .....	81

## ÍNDICE DE TABLAS

<b>Tabla 1</b> <i>Parámetros utilizados en el método de contribución de grupos.....</i>	47
<b>Tabla 2</b> <i>Valores de los parámetros para el cálculo de la inflamabilidad. ....</i>	49
<b>Tabla 3</b> <i>Tabla de propiedades de los componentes (acetaldehído). ....</i>	57
<b>Tabla 4</b> <i>Componentes de la base de datos de PRO/II con masa molecular menor a 100 g/mol, en fase líquida a 37,8 °C y 10,2 atm, y que son alcoholes, aldehídos, aminas o amidas. ....</i>	59
<b>Tabla 5</b> <i>Volatilidad relativa (<math>\alpha</math>) de las especies químicas candidatas a MSA. ....</i>	65
<b>Tabla 6</b> <i>Valores de toxicidad (X) e inflamabilidad (F) de las especies químicas candidatas a MSA. ....</i>	66
<b>Tabla 7</b> <i>Resultados de la simulación de la mezcla n-butano – trans-2-buteno. ....</i>	67
<b>Tabla 8</b> <i>Resultados de la simulación de la mezcla n-butano – trans-2-buteno con furfural como MSA.....</i>	68
<b>Tabla 9</b> <i>Número de platos N, razón de reflujo R, calor en el rehervidor y reflujo L para la mezcla sin MSA y para la mezcla en función de las especies candidatas a MSA... </i>	71
<b>Tabla 10</b> <i>Costo de las especies químicas candidatas a MSA. ....</i>	72
<b>Tabla 11</b> <i>Resultados de la separación de la mezcla n-butano y trans-2-buteno con glicerol como agente separador de masa. ....</i>	73

## ÍNDICE DE FIGURAS

<b>Figura 1</b>	<i>Etapas de fabricación de productos químicos de consumo configurados.</i>	24
<b>Figura 2</b>	<i>Definición de unidades de medida en PRO/II.</i>	41
<b>Figura 3</b>	<i>Selección de componentes en PRO/II.</i>	42
<b>Figura 4</b>	<i>Selección del paquete termodinámico en PRO/II.</i>	43
<b>Figura 5</b>	<i>Condiciones de operación del separador Flash en PRO/II.</i>	44
<b>Figura 6</b>	<i>Ventana de generación de los valores de K en PRO/II.</i>	45
<b>Figura 7</b>	<i>Algoritmo para establecer la presión de la columna de destilación y el tipo de condensador.</i>	51
<b>Figura 8</b>	<i>Columna Shortcut en PRO/II.</i>	53
<b>Figura 9</b>	<i>Especificaciones de la columna Shortcut en PRO/II.</i>	53
<b>Figura 10</b>	<i>Especificaciones de la segunda columna Shortcut en PRO/II.</i>	55
<b>Figura 11</b>	<i>Determinación de la fase de los componentes, separador Flash en PRO/II.</i>	57
<b>Figura 12</b>	<i>Ventana de la base de datos de componentes de PRO/II.</i>	58
<b>Figura 13</b>	<i>Valores de K obtenidos de PRO/II para la mezcla n-butano y trans-2-buteno.</i>	63
<b>Figura 14</b>	<i>Valores de K obtenidos de PRO/II para la mezcla n-butano y trans-2-buteno y el furfural como MSA.</i>	64
<b>Figura 15</b>	<i>Separador Flash y columna Shortcut en PRO/II.</i>	68
<b>Figura 16</b>	<i>Valores del número de platos, razón de reflujo y calor del rehervidor obtenidos de PRO/II para la mezcla n-butano y trans-2-buteno.</i>	69
<b>Figura 17</b>	<i>Valores del número de platos, razón de reflujo y calor del rehervidor obtenidos de PRO/II para la mezcla n-butano y trans-2-buteno y el furfural como MSA.</i>	70
<b>Figura 18</b>	<i>Separación en PRO/II de la mezcla n-butano y trans-2-buteno con glicerol.</i>	74

## Resumen

En el presente trabajo de titulación se determinó especies químicas a ser consideradas como agentes separadores de masa, que sustituyeron al furfural en la separación por destilación extractiva de la mezcla n-butano y trans-2-buteno. Se empleó el software de simulación AVEVA PRO/II™, con licencia para la Universidad de las Fuerzas Armadas. Se utilizó el proceso de desarrollo de productos en la búsqueda de agentes separadores de masa aplicando restricciones de selección las cuales fueron factor de separación, toxicidad, inflamabilidad, número de platos, razón de reflujo, calor en el rehervidor, reflujo y costo de las especies. Se realizó la colecta de información de especies químicas en el simulador, en base al peso molecular dado por el furfural en el rango de 1 a 100 g.mol<sup>-1</sup>, entre alcoholes, aldehídos, amidas y aminas que se encuentren en fase líquida a 37,8°C y 10,2 atm. Para la separación de mezclas por destilación extractiva los agentes separadores de masa se seleccionaron en función de su facilidad de recuperación considerando valores de factor de separación o volatilidad relativa mayor a uno. El método de contribución de grupos y el índice F se emplearon para la determinación de la toxicidad y la inflamabilidad de las especies. En el software con paquete termodinámico SRK se simuló la separación por secuencia directa para obtener el número de platos, razón de reflujo, calor en el rehervidor y reflujo. Los flujos molares para el proceso de separación fueron 154,7 kmol.h<sup>-1</sup>, 48,1 kmol.h<sup>-1</sup> y 194,688 kmol.h<sup>-1</sup> para el n-butano, trans-2-buteno y agente separador respectivamente. Con una recuperación del componente clave ligero de 96% y 4% de recuperación para el componente clave pesado, se añadió una etapa adicional para poder recuperar el agente y reciclarlo nuevamente al sistema. En base al análisis de las restricciones y el costo de compra de las especies químicas se determinó que las especies obtenidas 1,4-butanodiol, etilenglicol, glicerol y 1,2-propilenglicol son aptas para ser utilizadas como agentes separadores de masa.

*Palabras clave:* agentes separadores de masa, destilación extractiva, n-butano, trans-2-buteno, proceso de desarrollo de productos químicos, AVEVA PRO/II.

## Abstract

In the present work it was determined chemical species to be considered as mass separating agents, which replaced furfural in the separation by extractive distillation of the mixture n-butane and trans-2-butene. AVEVA PRO//II™ simulation software was employed, licensed for the Universidad de las Fuerzas Armadas. The product development process was used in the search for mass separating agents applying selection restrictions which were separation factor, toxicity, flammability, number of trays, reflux ratio, heat in the reboiler, reflux and cost of the species. The collection of chemical species was performed in the simulator, based on the molecular weight given by furfural in the range of 1 to 100 g.mol<sup>-1</sup>, among alcohols, aldehydes, amides and amines in liquid phase at 37,8 °C and 10,2 atm. For the separation of mixtures by extractive distillation, the mass separating agents were selected according to their ease of recovery, considering values of separation factor or relative volatility greater than one. The group contribution method and the F-index were used to determine the toxicity and flammability of the species. Direct sequence separation was simulated with the SRK thermodynamic package software to obtain the number of trays, reflux ratio, heat in the reboiler and reflux. The molar flows for the separation process were 154,7 kmol.h<sup>-1</sup>, 48,1 kmol.h<sup>-1</sup> and 194,688 kmol.h<sup>-1</sup> for n-butane, trans-2-butene and separating agent respectively. With a light key component recovery of 96% and 4% recovery for the heavy key component, an additional stage was added to recover the agent and recycle it back to the system. Based on the analysis of the restrictions and the cost of the chemical species, it was determined that the obtained species 1,4-butanediol, ethylene glycol, glycerol and 1,2-propyleneglycol are qualified to be used as mass separating agents.

*Keywords:* mass separating agents, extractive distillation, n-butane, trans-2-butene, product development process, AVEVA PRO//II.

## Capítulo I

### Introducción

#### Antecedentes

La destilación es un método de separación de sustancias que permite separar los distintos componentes de una mezcla en el procesamiento de plantas químicas (Bagajewicz & Manousiouthakis, 1992). La destilación es la técnica más eficiente y barata para separar una mezcla líquida basada fundamentalmente en una alta diferencia de volatilidades relativas entre los componentes y mayor diferencia entre sus puntos de ebullición, si la mezcla cumple con estos parámetros la separación será más factible (Kister et al., 1992).

La destilación extractiva requiere de un agente separador de masa ("MSA" por sus siglas en inglés), solvente que facilita la separación, que cambie la volatilidad relativa de los diversos componentes de la mezcla. Generalmente el MSA se agrega a la parte superior de la columna y se elimina como fondo junto con uno de los componentes de la mezcla, luego, los fondos se envían a una segunda columna de recirculación donde se elimina el segundo componente por el destilado y el agente separador es recirculado al sistema (Sun et al., 2018).

Seider et al., 2009) menciona un proceso de recuperación de butenos mediante separación de una mezcla de hidrocarburos; que contiene propano, n-butano, n-butenos (1-buteno, trans-2-buteno, cis-2-buteno) y n-pentano; proveniente de la deshidrogenación catalítica de butano. El proceso implica un conjunto de columnas de separación para la destilación ordinaria de los componentes, en una primera columna se separa el propano en la corriente de destilado y en los fondos se obtiene n-butano, n-butenos y n-pentano, dichos fondos se envían a una segunda columna donde se obtiene como producto destilado al n-pentano y de fondo n-butano y n-butenos.



Los fondos de la segunda columna no pueden separarse por medio de destilación ordinaria debido a que la volatilidad relativa que presenta esta mezcla (n-butano y n-butenos) es sólo de 1,03, por este motivo, se procede a emplear la destilación extractiva como alternativa más económica y aumentar la volatilidad relativa de la mezcla a 1,17 aproximadamente, debido a la adición de una fase extra llamada agente separador de masa, utilizando furfural al 96% (Seider et al., 2009).

La investigación y el desarrollo de nuevos productos de consumo general impulsado por el mercado parte de tecnologías y materiales para obtener nuevos productos químicos básicos que cumplan ciertas propiedades, ofreciendo una ventaja competitiva al mercado actual (Seider et al., 2009). El diseño de productos químicos en ingeniería química encuentra especies químicas que tengan ciertas propiedades funcionales acorde a la aplicación que se desee dar, también trata especies que cuando se agreguen a un sistema mejore sus propiedades funcionales deseables. Por lo tanto, el diseño de productos químicos implica la generación e identificación de una gran cantidad de especies químicas y/o mezclas de especies, y el espacio de búsqueda potencial es muy amplio (Zhang et al., 2018).

El proceso de desarrollo de productos es un marco operativo para llevar los proyectos de nuevos productos desde la idea hasta el lanzamiento y más allá, se opta por el desarrollo de productos químicos básicos, los cuales se fabrican a partir de recursos naturales. Diseñar un producto o planta de próxima generación para expandir la producción de un producto químico, y expandir su producción, y encontrar que existen muchas oportunidades para mejorar las tecnologías de procesamiento. La comprensión de los fracasos pasados y problemas del pasado conduce a una visión que da lugar a una acción correctiva, es decir, la búsqueda de alternativas que sustituyan al furfural como agente separador de la mezcla de hidrocarburos (Cooper, 2011).

## Planteamiento del problema

Como menciona Lei et al., (2003), la destilación extractiva siempre necesita un agente separador de masa adecuado ya que desempeña un papel importante en el diseño económico y energético de la separación.

Para que un proceso de destilación extractiva sea factible depende de la elección del solvente de extracción o agente separador de masa, el cual puede cambiar la volatilidad relativa de la mezcla original. La búsqueda y selección de agentes separadores de masa complica el diseño de una separación por destilación extractiva y se emplean criterios de selección que pueden llegar a ser una tarea abrumadora. Los diversos métodos para seleccionar un solvente o MSA se basan en parámetros relacionados con la termodinámica como la volatilidad relativa u operaciones del proceso de destilación como número de platos, razón de reflujo y calor en el rehervidor, y relaciones favorables entre el MSA y los costos (Sun et al., 2018).

Según Cooper (2011) el proceso de desarrollo de productos es un mapa conceptual y operativo para llevar los proyectos de nuevos productos desde la idea hasta el lanzamiento y más allá, se usa para gestionar el proceso de desarrollo de nuevos productos con el fin de mejorar la eficacia y la eficiencia. Este marco de trabajo se enfoca en identificar las especies químicas o la mezcla de especies químicas que tienen las propiedades deseadas tales como factor de separación o volatilidad relativa, número de platos, razón de reflujo, calor en el rehervidor, reflujo, toxicidad, inflamabilidad y costo, para satisfacer las necesidades específicas del consumidor quién busca inicialmente un proceso de destilación extractiva que consuma menos energía, que involucren productos químicos de bajo costo no tóxicos que sean seguros (es decir, no inflamables).

Restringiendo su búsqueda a especies químicas que involucran únicamente alcoholes, aldehídos, aminas o amidas, con masa molecular menor a 100 g/mol, y que se encuentren en fase líquida a 37,8 °C y 10,2 atm.

El mapa de innovación consta de 6 capas para su elaboración. Tecnología de materiales: materiales que permiten el nuevo producto. Tecnología de proceso/fabricación: procesos que permiten la fabricación del nuevo producto. Tecnología del producto: componentes del producto destinados a clientes de empresa a empresa. Propuesta de valor técnico: diferenciaciones o ventajas técnicas. Productos: un solo producto, familia de productos o plataforma de productos. Propuesta de valor para el cliente: atributos del producto, ventajas y diferenciaciones desde el punto de vista del cliente (Seider et al., 2009).

### **Justificación e importancia**

De acuerdo con Naeem et al., (2014) para la separación de la mezcla de hidrocarburos de butano y buteno el uso de la destilación extractiva puede ser considerada como opción idónea de separación de dicha mezcla, utilizando un solvente (MSA) adecuado que pueda llevar a cabo los objetivos requeridos de separación.

La creación de un mapa de innovación es importante ya que permite establecer estrategias para lanzar un producto nuevo al mercado, ayuda a establecer vínculos entre la tecnología, el producto y el mercado y a visualizar la introducción de muchos productos nuevos a lo largo del tiempo (Seider et al., 2009).

El software de simulación AVEVA PRO/IIITM presenta una base de datos de 15000 componentes, por este motivo se puede recurrir a su uso en la búsqueda de especies químicas candidatas a agentes separadores de masa (AVEVA, 2020).

Se pueden encontrar nuevos productos químicos que funcionen como agentes separadores de masa en la destilación extractiva de n-butano y trans-2-buteno implementando el proceso de desarrollo de productos y empleando restricciones de búsqueda y selección.

## **Objetivos**

### ***Objetivo General***

Obtener productos químicos para ser empleados como agente separador de masa para la separación de la mezcla n-butano y trans-2-buteno por destilación extractiva.

### ***Objetivos específicos***

Recolectar información relacionada sobre el grado actual de desarrollo del tema.

Revisión bibliográfica de la síntesis de trenes de separación y destilación extractiva.

Colectar información sobre la destilación extractiva de la mezcla n-butano y trans-2-buteno empleando furfural como agente separador de masa.

Aplicar el marco de proceso de desarrollo de productos para establecer restricciones de búsqueda y selección.

Buscar especies químicas usando una base de datos.

Emplear el software PRO/II para identificar agentes separadores de masa.

Evaluar el factor de separación, toxicidad, inflamabilidad, número de platos, razón de reflujo, calor en el rehervidor, reflujo, y costo de agentes separadores de masa.

## **Hipótesis**

¿Mediante la aplicación del método SGPDP y restricciones de selección es posible encontrar especies químicas idóneas como agentes separadores de masa que cumplan con la separación de la mezcla n-butano y trans-2-buteno?

## **Variables de investigación**

### ***Variable dependiente***

Factor de separación, toxicidad, inflamabilidad, número de platos, razón de reflujo, reflujo, calor en el rehervidor, reflujo y costos.

### ***Variable independiente***

Agentes Separadores de Masa.

## Capítulo II

### Fundamentación teórica

#### Marco de desarrollo de productos

El Proceso de desarrollo de productos coordina procesos o métodos de creación e innovación de proyectos, integrando un marco de decisión de inversión basado en opciones consistentes y probadas para guiar el desarrollo de productos innovadores. Se aplican estándares para evaluar proyectos de forma individual incluyendo planificación estratégica de productos, desarrollo, lanzamiento y protección de nuevos productos, Gestión de las relaciones y tecnologías comerciales conectando nueva tecnología al mercado (Cooper, 2011).

#### **SGPDP**

De acuerdo con Cooper (2011) el proceso de desarrollo de productos stage-gate (“SGPDP” por sus siglas en inglés) consta de una serie de pasos a seguir para el desarrollo de un producto, desde el origen de una idea hasta el lanzamiento del producto. Este método consta de 5 etapas, concepto, factibilidad, desarrollo, manufactura e introducción del producto, en cada etapa se determina si el producto avanza correctamente para seguir a la siguiente etapa.

Etapa 1 – Concepto, investigación y revisión bibliográfica para llevar a cabo la idea original.

Etapa 2 – Factibilidad, definir y justificar el producto llevando a cabo a cabo una investigación más detallada.

Etapa 3 – Desarrollo, instaurar el diseño y el desarrollo del nuevo producto, como resultado un prototipo del producto, así como el plan de introducción del producto al mercado.

Etapa 4 – Manufactura, fabricación del producto, prueba y validación del nuevo producto.

Etapa 5 – Introducción del producto, lanzamiento del nuevo producto al mercado.

### **SGTDP**

Proceso de desarrollo de tecnologías stage-gate (“SGTDP” por sus siglas en inglés), es un método de desarrollo de nuevos productos impulsado por la tecnología, consta de tres etapas, alcance tecnológico (se lleva a cabo una investigación bibliográfica para el desarrollo tecnológico de un proyecto); evaluación de tecnología (viabilidad técnica y justificación de la tecnología); y transferencia de tecnología (modelado completo de la tecnología y definición de un nuevo producto) (Seider et al., 2009).

En ambos casos se introduce el concepto de mapa de innovación para determinar las relaciones entre materiales, tecnologías de fabricación y producto según las necesidades del mercado.

### **Mapa de innovación**

Un mapa de innovación es la construcción por bloques de estrategias que permiten lanzar un producto nuevo al mercado, la creación del mapa de innovación contribuye a establecer vínculos entre la tecnología, el producto y el mercado. La evolución de los mapas de innovación ayuda a visualizar la introducción de muchos productos nuevos a lo largo del tiempo, es importante que al diseñar nuevos productos se comprenda completamente la historia antes de implementar nuevas tecnologías, necesidades de los clientes y productos que puedan integrarlas (Seider et al., 2009).

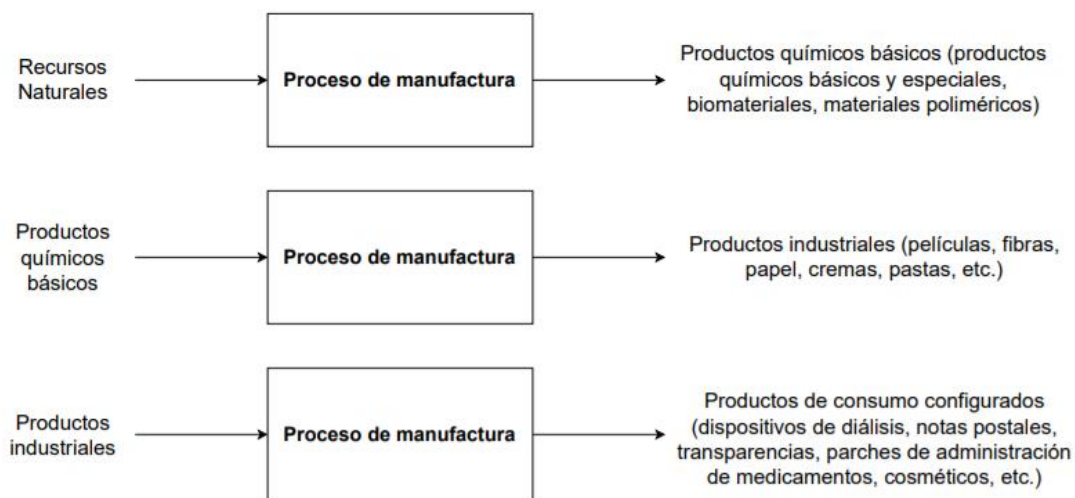
Los mapas de innovación existen para tres tipos de productos químicos: productos químicos básicos (se fabrican a partir de recursos naturales); productos químicos industriales (fabricados a partir de productos químicos básicos); y productos químicos de consumo configurados (se fabrican de productos químicos básicos y productos químicos industriales) (Seider et al., 2009)

### Productos químicos básicos

Los productos químicos básicos constituyen la base fundamental para la creación de nuevos productos petroquímicos, inorgánicos y materiales orgánicos sintéticos mediante la implementación de procesos químicos que implican una gran variedad de operaciones unitarias que dependen del diseño de la planta química, y de reacciones químicas básicas como la polimerización, la oxidación, la reducción, la hidrogenación (Seider et al., 2009)

### Figura 1

*Etapas de fabricación de productos químicos de consumo configurados.*



*Nota.* Tomado de Product and Process Design Principles: Synthesis, Analysis and Evaluation (3ra ed.) (p. 5), por Seider et al., (2009).



Como se observa en la Figura 1, los recursos naturales son los que dan origen a los productos químicos básicos que se tratan en primera instancia de mezclas de moléculas bien definidas que no pueden ser destinadas directamente al consumidor. Los productos químicos industriales surgen después de someter a algún proceso de manufactura a los productos químicos básicos logrando modificar sus propiedades funcionales, reológicas, sensoriales y físicas, pocos son los productos químicos que pueden ser destinados directamente al consumidor. Finalmente tenemos los productos químicos destinados al consumo que se elaboran a partir de productos químicos básicos e industriales que se caracterizan por sus configuraciones tridimensionales que ayudan a satisfacer las necesidades del consumidor. Algunos de estos productos poseen propiedades similares a los productos químicos industriales (Seider et al., 2009).

### ***n-Butano***

El n-butano se obtiene a partir del gas natural o de diferentes operaciones de refinería. Esta última especie química posee en su estructura cuatro átomos de hidrógeno secundarios que pueden ser sustituidos y tres enlaces carbono-carbono que se craquean a altas temperaturas. La principal aplicación es la regulación de la presión de vapor de la gasolina para favorecer el arranque en frío, también se puede isomerizar para dar origen al isobuteno u oxidarse hasta anhídrido maleico (Matar & Hatch, 2000).

### ***trans-2-Buteno***

El trans-2-buteno, el isobuteno y el cis-2-buteno son los tres isómeros que conforman el n-buteno. Estas últimas especies químicas se pueden obtener mediante craqueo catalítico a partir del butano, la cual puede separarse en un flujo que contiene isobuteno y otro que consiste en la mezcla de cis y trans-2-buteno.

La corriente que contiene la mezcla puede separarse por destilación fraccionada cada una con un rango de pureza de 80 a 90% (Matar & Hatch, 2000).

El principal uso del trans-2-buteno es que mediante la doble halogenación con HCl se obtiene el butadieno que se utiliza para la elaboración de caucho (Matar & Hatch, 2000).

### ***Furfural***

(Cavani et al., 2016) define al furfural como un líquido de color marrón derivado de materias vegetales, como la cascara de avena, el bagazo de caña y distintos subproductos agrícolas. Las aplicaciones y el valor del furfural mejorarán drásticamente al introducir la funcionalidad en la posición cinco de su estructura molecular. El furfural es usado en la industria para la obtención de alcohol furfurílico para la fabricación de cementos y selladores, como solvente para la obtención de aceites minerales, destilación fraccionada del petróleo, etc.

### ***1,4-Butanodiol***

Según Lee et al. (2019), el 1,4-butanodiol es un líquido viscoso a temperatura ambiente 16°C, incoloro y miscible en agua que sirve como materia prima para la fabricación de spandex, plásticos, producción del disolvente oxolano o tetrahidrofurano, películas y fibras. Existen cuatro procesos químicos para producir 1,4-butanodiol:

- Química Reppe, produce 1,4-butanodiol a partir de acetileno y formaldehído y la hidrogenación catalítica de 1,4-butanodiol.
- Proceso Lyondell, mediante isomerización del propileno e hidrogenación del 4-hidroxi-butiraldehído se obtiene 1-4-butanodiol.

- Acetoxilación del butadieno, donde reacciona con ácido acético y oxígeno para producir 1,4-diacetoxi-2-buteno que se hidrogena con catalizador de níquel formando un intermedio saturado que después se hidroliza obteniendo 1,4-butanodiol.
- Oxidación del butano a anhídrido maléico que se hace reaccionar con metanol para obtener maleato de dimetilo que se hidrogenan para formar 1,4-butanodiol.

### ***Etilenglicol***

El etilenglicol es un producto químico básico importante en la industria textil, derivados del poliéster, materiales de embalaje y dispositivos electrónicos. Se utiliza para la fabricación de anticongelantes, líquido de frenos hidráulicos y soluciones de descongelación para autos, barcos y aviones y como tinta para sellos. Se produce a partir de una gran variedad de materias primas principalmente la nafta, el etano, metanol a base de carbón y gas de síntesis a base de carbón. En la actualidad el etilenglicol se produce por oxidación del etileno, obteniendo óxido de etileno que en contacto con agua y en medio ácido forma monoetilenglicol, dietilenglicol, trietilenglicol y tetraetilenglicol (Fortes & Suard, 2011)

### ***Glicerol***

El glicerol o glicerina es un triol utilizado como disolvente, plastificante, emoliente, humectante, edulcorante y como relleno en productos alimenticios, para la fabricación de dinamita y propulsores (nitroglicerol), productos de cuidado personal y cuidado del cabello. Al combustionarse forma monóxido de carbono y dióxido de carbono, reacciona violentamente con oxidantes fuertes y algunos ácidos y presentando riesgo de incendio o explosión (Wurzel, 2005).

El glicerol se obtiene a partir de la cloración del propileno y la oxidación del ácido peracético del propileno. La cloración del propileno consiste en hipocloración del cloropreno, saponificación del dicloropropanol y la hidrólisis de la epiclorhidrina produciendo una solución acuosa de glicerina con cloruro de sodio, luego, se concentra, desala y destila obteniendo glicerina al 98% de pureza. El glicerol se obtiene también por hidrólisis de triglicéridos de ácidos grasos o la transesterificación de ácidos grasos y aceites (Bagnato et al., 2017).

### ***1,2-Propilenglicol***

Según Sullivan et al. (2018), el propilenglicol es un líquido claro, incoloro, miscible con agua y otros disolventes polares como alcoholes o acetona, es considerado poco soluble o insoluble en disolventes no polares como éteres de petróleo, hidrocarburos aromáticos y tetracloruro de carbono. Tiene características similares al etilenglicol y ha sido considerado como alternativa para el mismo en los sistemas anticongelantes de autos y descongelantes de los aviones. A nivel de industria el propilenglicol se obtiene a partir del óxido de propileno.

### **Agente separador de masa o MSA (Mass Separation Agent)**

Los procesos de separación se utilizan para obtención de componentes puros o mezcla de componentes a partir de mezclas. Se clasifican de acuerdo con el tipo de agente separador, que pueden ser agentes separadores de masa (“MSA”, por sus siglas en inglés), o agentes separadores de energía (“ESA” por sus siglas en inglés) (Li et al., 2011).

El proceso de separación que emplea un MSA se usa en secuencias de destilación para obtener una especie con mayor grado de pureza y las redes de intercambio de masas. Un agente separador de masa es un sólido parcialmente soluble o completamente miscible que actúa como absorbente, al saturarse. En este último caso, el MSA puede regenerarse periódicamente hasta que necesite un reemplazo (Li et al., 2011).

### **Criterios para elegir un agente separador de masa**

Los componentes clave, los tipos de separadores, el orden de separación y el agente separador de masas que se va a utilizar se eligen de forma sistemática empezando por la alimentación inicial, siguiendo Heurísticas y base de datos. López (2018) recomienda tomar en cuenta los siguientes pasos para la selección adecuada de un agente separador de masa:

- a) Selección de clase, clasificar los componentes de la alimentación por su polaridad y formación de enlaces con el hidrógeno.
- b) Selección de grupos químicos para que el agente separador no genere diferencias de polaridad entre los componentes de la mezcla que se alimenta. En esta etapa se puede emplear el criterio de solubilidad pues el agente debe tener una alta selectividad para poder modificar el equilibrio líquido-vapor.
- c) Azeotropía entre el agente separador de masa y los componentes de la alimentación.
- d) Separabilidad, es decir el agente separador de masa debe tener la facilidad de separarse de la mezcla para no fomentar la aparición de azeótropos.
- e) Elevada capacidad para disolver los componentes de la mezcla que van a separarse.

### **Factor de separación**

Para Seider et al. (2009) una de las consideraciones más importantes para la selección de un método de separación concreto es el factor de separación, el cual se define para una sola etapa de contacto entre dos componentes entre la fase i y ii.

El valor del factor de separación aumenta cuando la fase i es rica en el componente uno y la fase ii rica en el componente dos (Seider et al., 2009).

### ***Volatilidad relativa***

La volatilidad relativa también es considerada como factor de separación. Este parámetro es la relación que existe entre las concentraciones de los componentes claves entre la fase líquido y el vapor. Cuando las fracciones de uno de los componentes clave disminuyen favorece a la separación por destilación debido a que la diferencia entre la composición del líquido y el vapor aumenta (Treybal, 1988).

### **Destilación**

La destilación es el método principal que se usa para la separación en el procesamiento de plantas químicas, a pesar de su baja eficiencia termodinámica (Bagajewicz & Manousiouthakis, 1992).

Kister et al. (1992) afirma que, desde el punto de vista cinético, la transferencia de masa por unidad de volumen en la destilación está limitada únicamente por las resistencias de difusión a ambos lados de la interfase vapor-líquido en fases turbulentas sin presencia de inertes. La destilación, por lo tanto, tiene el potencial de lograr altas tasas de transferencia de masa con un costo de inversión relativamente bajo.

Según Kister et al. (1992), desde el punto de vista termodinámico, la eficiencia termodinámica típica de un sistema de destilación es de aproximadamente el 10%. Esto puede mejorarse si se utilizan más condensadores y hervidores. Aunque una eficiencia termodinámica del 10% parece baja no se tiene a disposición otros procesos que logren eficiencias mayores.

En general, la destilación es el método más eficiente y barato para separar una mezcla líquida, sin embargo, existen ciertos parámetros bajo los cuales no es posible realizar un proceso de destilación, y estos son (Kister et al., 1992):

- Cuando la diferencia de volatilidades entre los componentes es pequeña.
- Cuando se requiere recuperar una pequeña cantidad de componente de alto punto de ebullición de la alimentación.
- Cuando se tiene un compuesto térmicamente inestable o en condiciones de vacío.
- La mezcla es extremadamente corrosiva o altamente incrustante.

### ***Destilación azeotrópica***

Las mezclas azeotrópicas complican el diseño de una columna de destilación ya que presentan más de una zona de destilación. Estas mezclas se presentan en la mayoría de los procesos químicos por lo que la única forma viable de poder encontrar parámetros como, la sensibilidad paramétrica, los estados estables múltiples, los transitorios largos y la dinámica no lineal es el diseño por simulación empleando modelos teóricos, aunque cuando se presentan sistemas complejos como el método de prueba y error, aunque sea tedioso es el más indicado para calcular la composición y los caudales de los productos en el destilado (Chien et al., 1999).

La destilación azeotrópica se emplea para separar una mezcla azeotrópica. Las columnas de destilación azeotrópicas controlan de manera eficiente el comportamiento en estado estacionario y dinámico pese a que el sistema resulta en ocasiones muy complejo (Wasylkiewicz et al., 2000)

Dado que los métodos para la destilación azeotrópica se han desarrollado para mezclas ideales bajo varios supuestos simplificadores, no son precisos para mezclas no ideales y pueden dar estimaciones iniciales que están lejos de la solución final o no son factibles (Chien et al., 1999).

### ***Destilación extractiva***

De acuerdo con Lei et al. (2003) la destilación extractiva se aplica habitualmente en la industria, y se está convirtiendo en un método de separación cada vez más importante en la ingeniería petroquímica. Esta operación unitaria se caracteriza por utilizar agentes separadores con elevado punto de ebullición que sirve para aumentar la volatilidad relativa permitiendo obtener un componente puro en la parte superior de una columna y el otro, junto con el disolvente en la parte inferior, que puede separarse fácilmente en una columna de destilación secundaria, debido a un punto de ebullición elevado del disolvente.

Se utiliza principalmente en la separación de hidrocarburos con un punto de ebullición cercano y para la separación de mezclas que presentan un azeótropo. La secuencia de separación de las columnas, la combinación con otros procesos de separación, la configuración de las bandejas y el funcionamiento se incluyen en el proceso de destilación extractiva (Lei et al., 2003).

La selección del agente separador adecuado desempeña un papel importante en el diseño económico de la destilación extractiva, se conoce como agente de separación óptimo aquellos que reducen la proporción de disolvente y la carga de líquido de la columna de destilación. Se dispone de cuatro tipos de disolventes utilizados en la destilación extractiva, la sal sólida, el disolvente líquido, la combinación de disolvente líquido y sal sólida, y el líquido iónico (Lei et al., 2003).



## **Columna de destilación**

Las columnas de destilación han tomado relevancia en el campo de la ingeniería de procesos debido a que son consideradas con un sistema en sí mismo debido a que incluye un conjunto de tanques Flash (condensador y rehervidor) conectados generalmente en cascada (Skogestad & Morari, 1988).

La base para entender las propiedades dinámicas y de control de las columnas de destilación, es tener una buena apreciación de su comportamiento tanto de las columnas con bandejas como de las columnas empacadas en estado estacionario permitiendo usar un modelo de equilibrio por etapas. El factor crítico suele ser una buena descripción del equilibrio vapor-líquido que se logra ajustando el número de etapas teóricas en cada etapa para que coincida con las purezas del producto y el perfil de temperatura. A veces se utilizan las eficiencias de las bandejas, especialmente si el número de etapas teóricas es pequeño (Skogestad & Morari, 1988).

### ***Número de platos***

Las columnas de destilación usan métodos que emplean el contacto de vapor y líquido fomentando la transferencia de materia para obtener el número de etapas requeridas en el equilibrio, para determinar el número de platos es necesario realizar balances de materia en función de ciertas partes de la columna de destilación. El método gráfico propuesto por McCabe y Thiele determina el número de platos o etapas teóricas necesarios para la separación de una mezcla binaria de A y B (Geankoplis, 2006).

### ***Número mínimo de platos***

Para Skogestad & Morari (1988) el número mínimo de platos para una separación determinada se obtiene con flujos internos infinitos de vapor  $V_i$  y líquido  $L_i$  por unidad de alimentación. Esto siempre es válido para las columnas de alimentación con mezclas ideales. Un balance de materia en cualquier parte de la columna  $V_i = L_i + 1$ , y de forma similar un balance de masa por componente da  $V_i y_i = L_i * (1 - y_i) + 1$ .

### ***Número infinito de platos***

Según Skogestad & Morari (1988), con un número infinito de etapas, podemos reducir el consumo de energía hasta que se produzca una zona de compresión en algún punto de la columna. En el caso de una separación binaria, esto suele ocurrir en la etapa de alimentación donde la línea de balance de materia y la línea de equilibrio se encuentran.

### ***Razón de reflujo***

La relación de reflujo es la relación entre la cantidad de reflujo que retorna a la columna de destilación y la cantidad de reflujo que se recoge en el destilado. Por ejemplo, si cuatro partes del reflujo retornan a la columna de destilación y una parte se recoge como destilado, la relación de reflujo es de 4:1 (Geankoplis, 2006).

Cuanto mayor sea la relación de reflujo, mayor será el contacto del líquido con el vapor en la columna de destilación, entonces se puede afirmar que a una mayor relación de reflujo se obtendrá un destilado con mayor grado de pureza (Geankoplis, 2006)

Cuando la relación de reflujo aumenta se necesitarán menos etapas de equilibrio, ya que la línea de operación estará más alejada de la curva de equilibrio por lo que el número de etapas teóricas depende de la relación de reflujo  $R = L/D$  (Treybal, 1988).

### ***Reflujo***

En las columnas de destilación para lograr una separación más completa del producto se usa el reflujo que fluye desde el plato uno hacia el último plato para refrigerar y condensar los vapores que atraviesan el interior de la columna en sentido contrario a la dirección de la gravedad. El líquido que regresa a la columna en el plato uno se denomina reflujo y el material que se retira es el destilado enriquecido con el componente más volátil (Treybal, 1988).

### **Toxicidad de una especie química**

Con frecuencia, los efluentes gaseosos o líquidos de las distintas operaciones unitarias empleadas en la industria química presentan pequeñas cantidades de especies químicas residuales que contaminan los productos. Para mantener los límites medioambientales, es importante utilizar vías de reacción para reducir la toxicidad de los subproductos durante la síntesis del proceso preliminar, cuando se posicionan las operaciones de reacción (Raimondo et al., 2007).

Otra consideración es diseñar la planta para utilizar productos químicos reciclados. Cuando se realiza esta última actividad, es necesario conocer la composición de los productos químicos de desecho (Raimondo et al., 2007).

### ***Método de contribución de grupos***

Como expresa Fredenslund & Rasmussen (1986), el método de contribución de grupos utiliza los datos de equilibrio de fase existentes. Este último método permite predecir el equilibrio de fase de los sistemas de los que no se dispone de datos, así como también deduce los coeficientes de actividad a partir de datos experimentales, parámetros que caracterizan las

interacciones entre los grupos estructurales en sistemas no electrolíticos y coeficientes de actividad de otros sistemas que no han sido estudiados experimentalmente.

Las consideraciones del método de contribución de grupos son (Fredenslund & Rasmussen, 1986):

- Se asume que el logaritmo del coeficiente de actividad es la suma de dos contribuciones: una parte combinatoria, debida a las diferencias de tamaño y forma de las moléculas de la mezcla, y una parte residual, debida esencialmente a las interacciones energéticas.
- Las contribuciones individuales de los grupos son sólo una función de las concentraciones de los grupos y de la temperatura.
- La parte residual de las interacciones de grupo se supone que es la suma de las contribuciones individuales de cada grupo de soluto en la solución menos la suma de las contribuciones de cada grupo en el entorno del componente puro.

### **Inflamabilidad de una especie química**

La inflamabilidad es una propiedad emergente de los rasgos químicos y físicos de una especie química, aunque el estudio de estos parámetros no es variado, se ha podido identificar ciertas características que facilitan la ignición de una especie química, la intensidad de la combustión y el mantenimiento de la combustión en el tiempo son componentes de la inflamabilidad y pueden medirse a múltiples escalas (Simpson et al., 2016).

Según Simpson et al. (2016), los parámetros que influyen en la inflamabilidad están relacionados con la cantidad, la calidad, el contenido de humedad y la aireación de la biomasa.

La cantidad de biomasa es crítica para la combustibilidad y la tasa de propagación del fuego porque influye directamente en la tasa de producción de energía, el contenido de humedad determina el grado de absorción de la energía calorífica por parte de las especies químicas.

### ***Índice F***

En la actualidad existen un sinnúmero de datos sobre la inflamabilidad de las especies químicas que son obtenidos a partir de distintos métodos, pero lo que resulta complicado es comprender las verdaderas características individuales de inflamabilidad de los gases a partir de datos correspondientes al límite de inflamabilidad, por ejemplo, se reconoce que las características de inflamabilidad del metano, el etano y el propano son muy similares entre sí, mientras que sus valores de límites de inflamabilidad son bastante diferentes (Kondo et al., 2001).

### **Costo de compra de una especie química**

El costo de una especie química producida en un proceso se realiza en función de los correspondientes costos (Jiménez, 2003).

Hoy en día se realizan numerosos estudios para encontrar especies químicas que permitan desplazar a otras que se obtienen con procesos más costosos. En los procesos de separación debido a que sus costos de diseño son elevados, el costo de la especie química es muy importante a la hora de seleccionar un determinado proceso de separación, puesto que si tenemos un bajo costo implica un gasto menor de energía en el proceso de obtención.

Económicamente hablando el costo de una especie química también varía de acuerdo con la demanda que presentan a nivel industrial (Jiménez, 2003).

## **Software AVEVA PRO/II™**

El software AVEVA PRO/II™ es una herramienta de simulación que ofrece una solución para el diseño de procesos industriales en estado estacionario que tienen rigurosos balances de masa y energía como por ejemplo la destilación reactiva (AVEVA, 2020).

También permite realizar análisis operativos y de costos basados en métodos termodinámicos y datos de propiedades físicas que se encuentran en el programa. Cuando no se disponen de datos necesarios para la predicción de propiedades, este programa emplea el método de contribución de grupos UNIFAC (AVEVA, 2020).

Las operaciones unitarias en el entorno de simulaciones son modelos generales de diagramas de flujo como las válvulas, compresores, turbinas, bombas, etc. Los modelos de intercambio de calor vienen descritos por curvas de calentamiento y enfriamiento. También incluye modelos de destilación, modelos de reactores y una base de bancos de datos limitados que puede ser modificada mediante el modelado de sólidos (Ghasem, 2021).

Debido a la gran demanda de proyectos e investigaciones es de vital importancia entregar un informe rápido y detallado del costo del diseño de un determinado proceso, el simulador PRO/II tiene la ventaja de acelerar el proceso de diseño mediante el uso de estimaciones precisas para evaluar las alternativas a lo largo del ciclo de vida de un proyecto asegurando una mejor calidad y precisión, minimizando de esta manera el riesgo de pérdida de equipos y accidentes laborales.

### ***Paquetes termodinámicos***

Los paquetes termodinámicos del software AVEVA PRO/II™ son generadores de propiedades que predicen los valores de K, densidad, entalpía, entropía y transporte.

Con la corriente fija como base de cálculo y dos variables independientes como presión y temperatura, el software calcula todas las propiedades termodinámicas de la corriente especificada con los generadores definidos en ese conjunto (AVEVA, 2020).

AVEVA, (2020) reporta los paquetes termodinámicos más frecuentes en la industria petroquímica, refinación del petróleo y gas:

- Soave-Redlich-Kwong (SRK)
- UNIFAC
- UNIQUAC
- NRTL
- Wilson

### **SRK**

Soave-Redlich-Kwong (“SRK” por sus siglas en inglés), es una ecuación de estado resultado de la modificación de la ecuación simple de Redlich-Kwong, se utiliza para la predicción de propiedades de mezclas no polares de hidrocarburos y predecir valores de K. El software PRO/II comprende correlaciones para sistemas con hidrocarburos, N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>S y CO<sub>2</sub>, también mezclas como etano – etileno y propano – propileno. SRK tiene aplicación en procesos de hidrocarburos ligeros, procesamiento de gas natural y procesamiento de productos ligeros en las plantas de gas de las refinerías (AVEVA, 2020).

## Capítulo III

### Marco metodológico

#### Introducción

La simulación de la obtención de productos químicos para ser empleados como agentes separadores de masa (“MSA” por sus siglas en inglés) se realizó empleando el software de simulación AVEVA PRO/II™ de (AVEVA, 2020). La metodología empleada para el desarrollo del presente trabajo de titulación se divide en cinco etapas o cinco restricciones de búsqueda y selección detalladas a continuación:

- Extracción de datos.
- Factor de separación.
- Evaluación de la toxicidad e inflamabilidad de las especies químicas.
- Determinación del número de platos, razón de reflujo, calor en el rehervidor y reflujo.
- Costo de compra de las especies químicas.

#### Extracción de datos

Según Seader et al. (2010) las especies químicas que han tenido mejores resultados como agentes arrastradores para la destilación extractiva han sido líquidas. Por lo tanto, en el presente trabajo se emplean únicamente especies que sean alcoholes, aldehídos, aminas y amidas que se encuentran en fase líquida a una temperatura de 37,8 °C y 10,2 atm, como ocurre para el furfural (Seider et al., 2009). Esta información se obtiene con el software PRO/II al emplear un separador Flash, de acuerdo con los siguientes pasos:

- Crear una nueva simulación en PRO/II.



- Inicializar el sistema de unidades de medida como METRIC-SET1 y la presión en atmósferas, como se muestra en la Figura 2.
- Seleccionar los componentes como se evidencia en la Figura 3.
- Elegir el paquete termodinámico Thermo → Most Commonly Used → Soave-Redlich-Kwong (Gil Chaves et al., 2016), acorde con la Figura 4.
- Colocar las condiciones de alimentación y de operación del tanque Flash como en la Figura 5.
- Comprobar la fase en la que se encuentran las especies químicas.

**Figura 2**

*Definición de unidades de medida en PRO/II.*

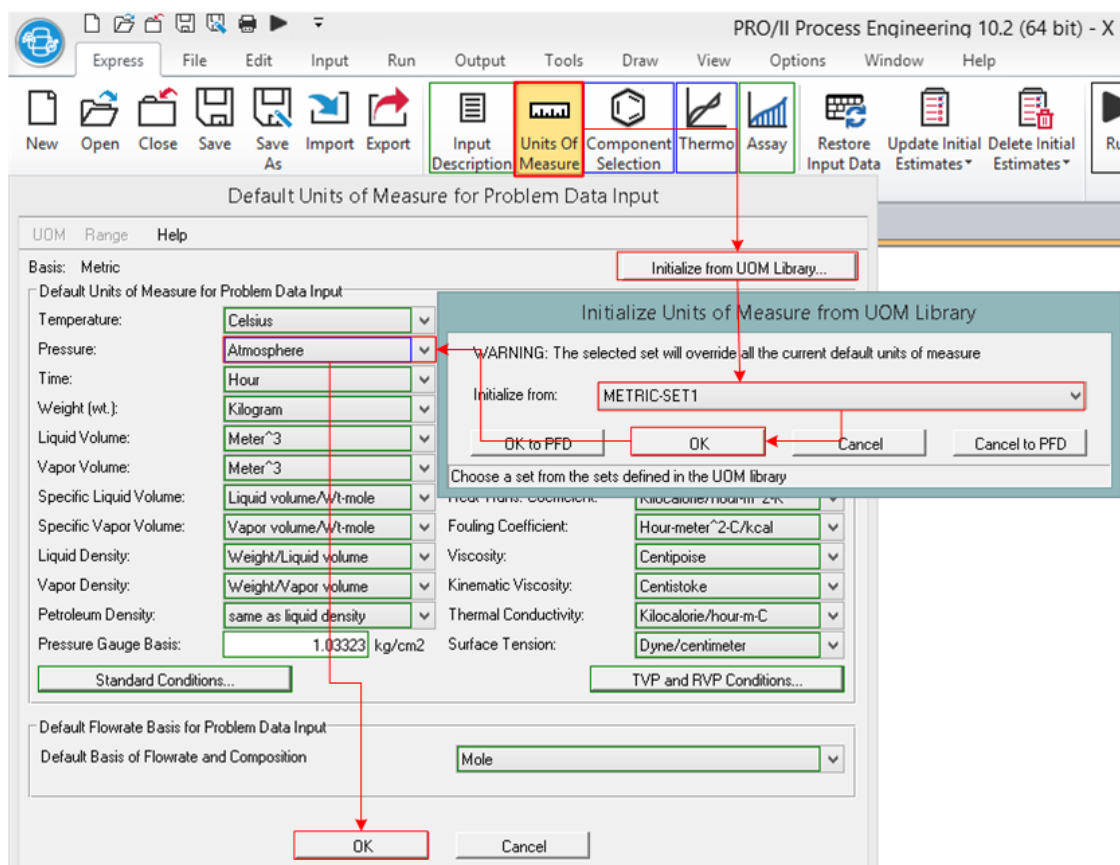


Figura 3

Selección de componentes en PRO/II.

The image shows two overlapping windows from the PRO/II software interface. The top window is titled "Component Selection - List/Search" and the bottom window is titled "Component Selection".

**Top Window: Component Selection - List/Search**

- Component Databank:** A list of databanks is shown, with "All Component Banks" selected.
- Sort/Search by:** Radio buttons for "Full Name" (selected), "Chemical Formula", "SIMSCI Name/Alias", and "CAS Number".
- Match:** Radio buttons for "Initial String" (selected) and "Embedded Substring".
- Search String:** The text "FURFURAL" is entered in the search field.
- Component Full Name:** "Furfuraldehyde" is selected in the list.
- Buttons:** "Add Components" and "Remove Components" are visible.

**Bottom Window: Component Selection**

- Component Name/Alias:** A list of components is shown, with "ACETALD" at the top.
- Databank Search Order:** A list of databanks is shown, with "CURRENT" at the top.
- Buttons:** "OK" and "Cancel" are visible.

Red arrows indicate the workflow: from the "Component Selection" menu in the top toolbar to the "Component Selection - List/Search" dialog, then to the "Add Components" button, and finally to the "OK" button in the "Component Selection" dialog.

Figura 4

Selección del paquete termodinámico en PRO/II.

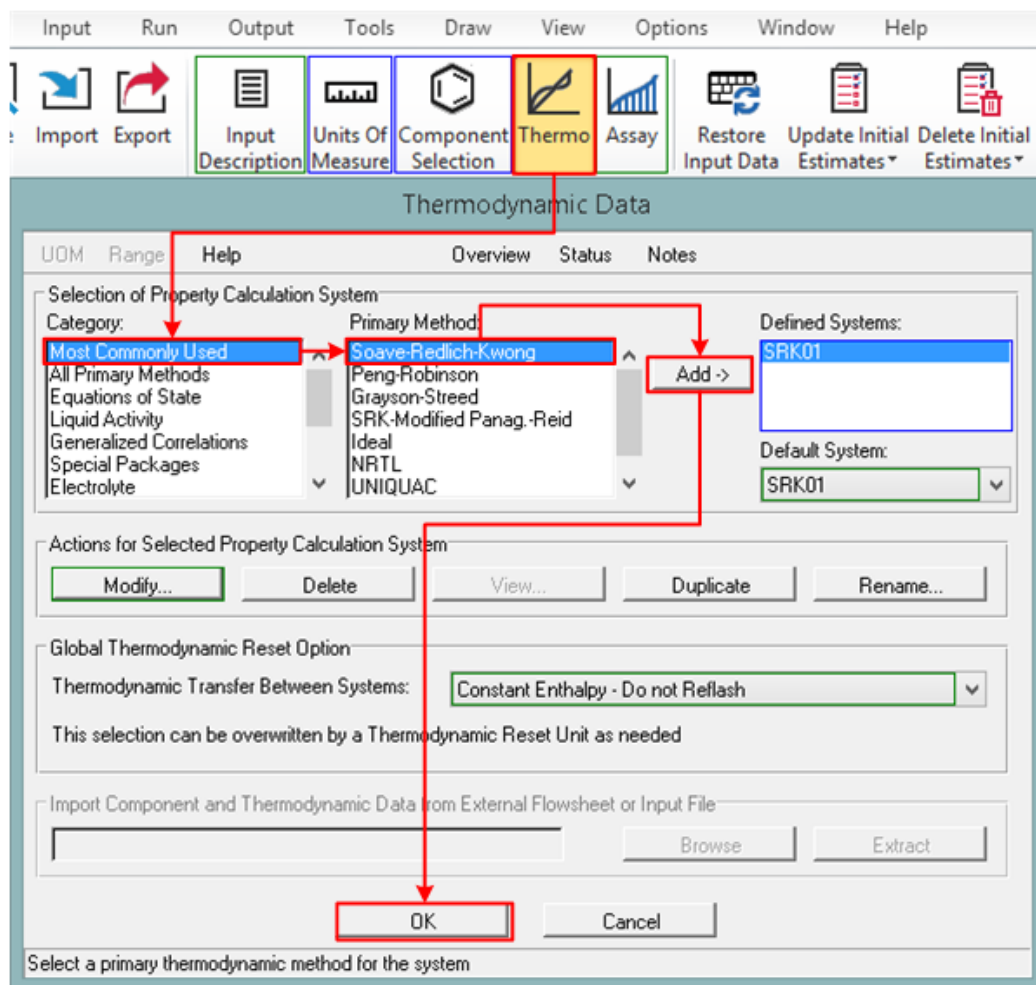


Figura 5

Condiciones de operación del separador Flash en PRO/II.

The image displays the configuration process for a Flash separator in PRO/II, showing three main dialog boxes and a process flow diagram.

**Stream Data Dialog:** Shows the configuration for stream S1. The 'Stream Type' is set to 'Composition Defined'. The 'Thermal Condition' is set to 'Temperature' at 37.8 C and 'Pressure' at 10.2 atm. The 'Thermodynamic System' is 'Determined From Connectivity'. The 'OK' button is highlighted.

**Stream Data - Flowrate and Composition Dialog:** Shows the configuration for stream S1. The 'Fluid Flowrate Specification' is set to 'Total Fluid Flowrate' at 1 kg-mol/hr. The 'Total LV or GV rate Basis' is 'Standard Basis'. The 'Component Composition' table is shown below:

Copy	Component	Composition Mole
Paste	ACETALD	1
	CRTA	
	FORMALD	
	FURFURAL	
	GLYOXAL	
	BUTALD	
	MACR	

The 'Total Fluid Flowrate' is 1.0000. The 'OK' button is highlighted.

**Flash Drum Dialog:** Shows the configuration for the Flash Drum. The 'Unit' is 'F1'. The 'First Specification' is 'Pressure' at 10.2 atm. The 'Thermodynamic System' is 'Default (SRK01)'. The 'Second Specification' is 'Unit Specification' at 'Temperature' 37.8 C. The 'Phase Assignment' is 'Default'. The 'OK' button is highlighted.

**Process Flow Diagram:** Shows a Flash separator (F1) with an inlet stream S1 and two outlet streams S2 and S3.

**Component Palette:** Shows the 'Flash' component selected in the 'Block Diagram' section.

## Factor de Separación

Como afirma Seider et al. (2009), para la separación de mezclas por destilación extractiva los MSA se seleccionan en función de su facilidad de recuperación y para lograr valores relativamente grandes de factor de separación. La volatilidad relativa ( $\alpha$ ) entre los dos componentes clave que conforman la mezcla a separar debe ser  $\alpha > 1,05$ .

El factor de separación considera los valores de K de las especies químicas en análisis según la ecuación 1 (Seider et al., 2009).

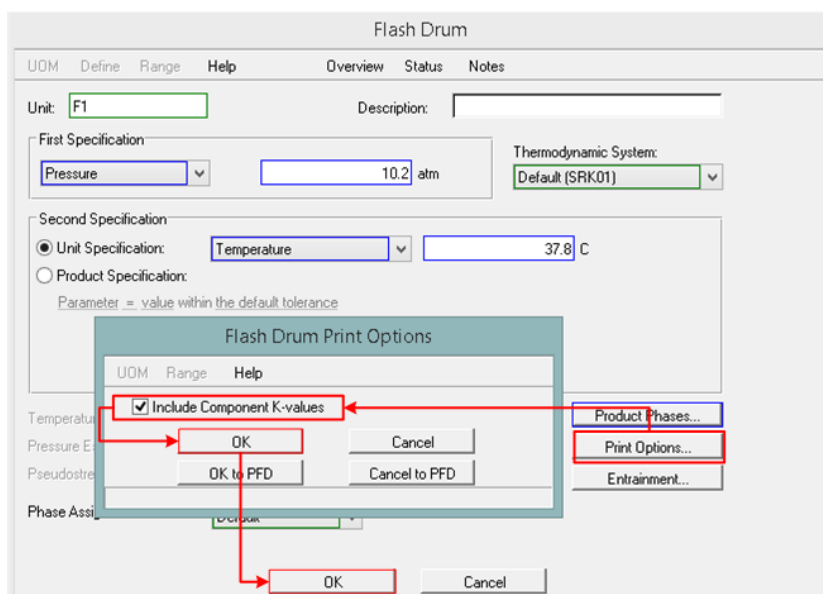
$$SF = \frac{K_1}{K_2} = \alpha_{1,2} \quad [ 1 ]$$

Donde  $K_1$  es el valor correspondiente al componente más volátil y  $K_2$  es el valor del componente menos volátil. En este caso la mezcla n-butano (1) y trans-2-buteno (2).

Los valores de K fueron hallados en PRO/II, mediante un separador Flash siguiendo los mismos pasos del apartado anterior y añadiendo la opción mostrada en la Figura 6 para generar el reporte de los valores de K de los componentes.

## Figura 6

Ventana de generación de los valores de K en PRO/II.



## Toxicidad e inflamabilidad

La evaluación de la toxicidad y la inflamabilidad de las moléculas es determinante para buscar especies químicas que operen como agentes separadores de masa.

### *Método de contribución de grupos*

Con los datos obtenidos de la literatura (Martin & Young, 2001) se logró hallar la toxicidad de los componentes mediante el método de contribución de grupos o concentración letal, ecuación 2.

$$-\log(LC_{50}) = \sum_{i=1}^{ng} n_i \alpha_i \quad [ 2]$$

Donde  $n_i$  es el número de grupos del tipo  $i$  en el compuesto y  $\alpha_i$  es la contribución a la toxicidad del grupo  $i$ .

Por medio de una revisión visual o superficial de la estructura del compuesto y los grupos funcionales que lo conforman se hace uso de los valores de la Tabla 1 para cada grupo o parámetro. A partir de la ecuación 2, según la molécula o especie a evaluar, se toma en cuenta el número y el tipo de cada grupo que la constituye, y se multiplica por el correspondiente valor de contribución grupal según la Tabla 1. Seguidamente, la sumatoria de todos estos últimos productos proporcionará el resultado del valor de toxicidad para un solo producto químico evaluado.

**Tabla 1**

*Parámetros utilizados en el método de contribución de grupos.*

<b>Grupo</b>	<b>Descripción</b>	<b>Valor</b>
<b>CH<sub>3</sub></b>	metil	0,6172
<b>CH<sub>2</sub></b>		0,4464
<b>CH</b>		0,1522
<b>C</b>		-0,1861
<b>H</b>		0,2212
<b>CH = O</b>	aldehído	2,5539
<b>C = O</b>	cetona	0,0004
<b>O</b>	éter	-0,2392
<b>NH<sub>2</sub></b>	amina primaria	0,511
<b>NH</b>	amina secundaria	-0,1157
<b>N</b>	amina terciaria	-0,7043
<b>OH</b>	hidroxilo	-0,2125

*Nota.* Recuperado de Prediction of the Acute Toxicity (96-h LC50) of Organic Compounds to the Fathead Minnow (pimephales promelas) Using a Group Contribution Method, por Martin & Young, (2001).

### **Índice F**

Los valores de inflamabilidad para los compuestos se determinaron usando el índice F, el cual se utiliza para predecir características de inflamabilidad de productos químicos dependiendo de su estructura molecular.

Los datos de inflamabilidad para el furfural y 1,2-propilenglicol son extraídos de la literatura (Kondo et al. 2001). Por otro lado, para el 1,4-butanodiol, etilenglicol y glicerol se usa la ecuación 3 (Kondo et al., 2001).

$$F = p_1(1 + p_2C_1 + p_3R_{OE} + p_4R_{CO} + p_5R_{COO} + p_6R_{NH} + p_7R_{RNG} + p_8R_{ARM} + p_9R_{US})(1 + p_{10}R_F + p_{11}R_{Cl} + p_{12}R_{Br} + p_{13}R_{OH} + p_{14}R_{NO_2} + p_{15}R_{NH_2} + p_{16}R_{CN} + p_{17}R_{COOH}) \quad [3]$$

Donde  $p_1$  a  $p_{17}$  serán constantes,  $C_1$  es igual a uno para el caso de un esqueleto carbonado lineal, por ejemplo, el n-heptanol, de lo contrario será igual a cero.

Además, se considera si la especie contiene grupos éter ( $R_{OE}$ ), grupos carbonilo ( $R_{CO}$ ), éster ( $R_{COO}$ ), imina ( $R_{NH}$ ), anillos alifáticos ( $R_{RNG}$ ), anillos aromáticos ( $R_{ARM}$ ) y si la especie tiene dobles enlaces ( $R_{US}$ ) en el esqueleto de carbón, incluyendo los enlaces dobles de los anillos alifáticos y aromáticos. En el tercer factor de la ecuación está  $R_F$ ,  $R_{Cl}$ ,  $R_{Br}$ ,  $R_{OH}$ ,  $R_{NO_2}$ ,  $R_{NH_2}$ ,  $R_{CN}$ ,  $R_{COOH}$  y se presentan si la estructura de la molécula contiene átomos de F, Cl, Br, grupos OH, NO<sub>2</sub>, NH<sub>2</sub>, CN y COOH, respectivamente. Los factores R de  $p_3$  a  $p_9$  se dividen para el número total de carbonos presentes en la estructura, y los factores R de  $p_{10}$  a  $p_{17}$  se dividen para el número de átomos de hidrógeno que tiene la molécula en análisis. La ecuación 3 se simplifica en la ecuación 4 (Kondo et al., 2001).

$$F = p_i \sum_{i=1}^n p_{i+1} R_i \quad [4]$$

Los valores para los parámetros descritos se reportan en la Tabla 2.



Como plantea Kondo et al. (2001) los límites de inflamabilidad de una especie son los siguientes: para valores de índice F de 0,0 a 0,2 son clasificados como poco inflamables, el rango de 0,2 a 0,4 se considera débilmente inflamable, entre 0,4 y 0,6 son normalmente inflamables y el límite de 0,6 a 0,8 considerado fuertemente inflamable.

**Tabla 2**

*Valores de los parámetros para el cálculo de la inflamabilidad.*

<b>N°</b>	<b>Descripción</b>	<b>Valor</b>
<b>p<sub>1</sub></b>	Coeficiente principal	0,581
<b>p<sub>2</sub></b>	Un carbono	-0,194
<b>p<sub>3</sub></b>	Éter	0,134
<b>p<sub>4</sub></b>	Carbonilo	0,028
<b>p<sub>5</sub></b>	Éster	-0,097
<b>p<sub>6</sub></b>	NH	-0,014
<b>p<sub>7</sub></b>	Anillo alifático	0,299
<b>p<sub>8</sub></b>	Anillo aromático	-0,125
<b>p<sub>9</sub></b>	Insaturación	0,290
<b>p<sub>10</sub></b>	F	-0,344
<b>p<sub>11</sub></b>	Cl	-0,985
<b>p<sub>12</sub></b>	Br	-3,160
<b>p<sub>13</sub></b>	OH	0,284
<b>p<sub>14</sub></b>	NO <sub>2</sub>	0,527
<b>p<sub>15</sub></b>	NH <sub>2</sub>	-0,344
<b>p<sub>16</sub></b>	CN	-0,566
<b>p<sub>17</sub></b>	COOH	-0,850

*Nota.* Recuperado de Prediction of flammability of gases by using F-number analysis, por Kondo et al. (2001).

## **Determinación del número de platos, razón de reflujo, calor en el rehervidor y reflujo**

Existen Heurísticas que involucran la determinación de la razón de reflujo, el número de platos en una columna de destilación y el flujo de calor en el rehervidor, lo cual permite encontrar la secuencia más favorable económicamente. Estas heurísticas tienen efecto sobre los componentes no clave en una separación de dos componentes clave. Los componentes no clave son los que aumentan varios factores como son los requerimientos de reflujo, el número de platos y el costo de funcionamiento del rehervidor (Seider et al., 2009). Es por esta razón que el estudio de estos parámetros es determinante en la realización del presente trabajo.

Seider et al. (2009) sostienen que el calor que circula en el rehervidor no debe ser excesivo, es decir, analizando la volatilidad relativa, la separación de la mezcla en estudio no debe operar con una baja volatilidad relativa entre los dos componentes clave ya que este proceso implica un exceso de carga en el rehervidor ralentizando la destilación.

### ***Secuencias de separación***

Como plantean Seider et al. (2009), el número de secuencias a emplearse en la separación de tres componentes es igual a dos, las cuales son la secuencia directa y la secuencia indirecta. El presente trabajo se enfoca en el análisis de una de las posibles secuencias, la secuencia directa A/BC, para la mezcla A: n-butano, B: trans-2-buteno y C: furfural. La finalidad es secuenciar los componentes a separar en orden de disminución de la volatilidad relativa.

### ***Selección de la presión y el tipo de condensador***

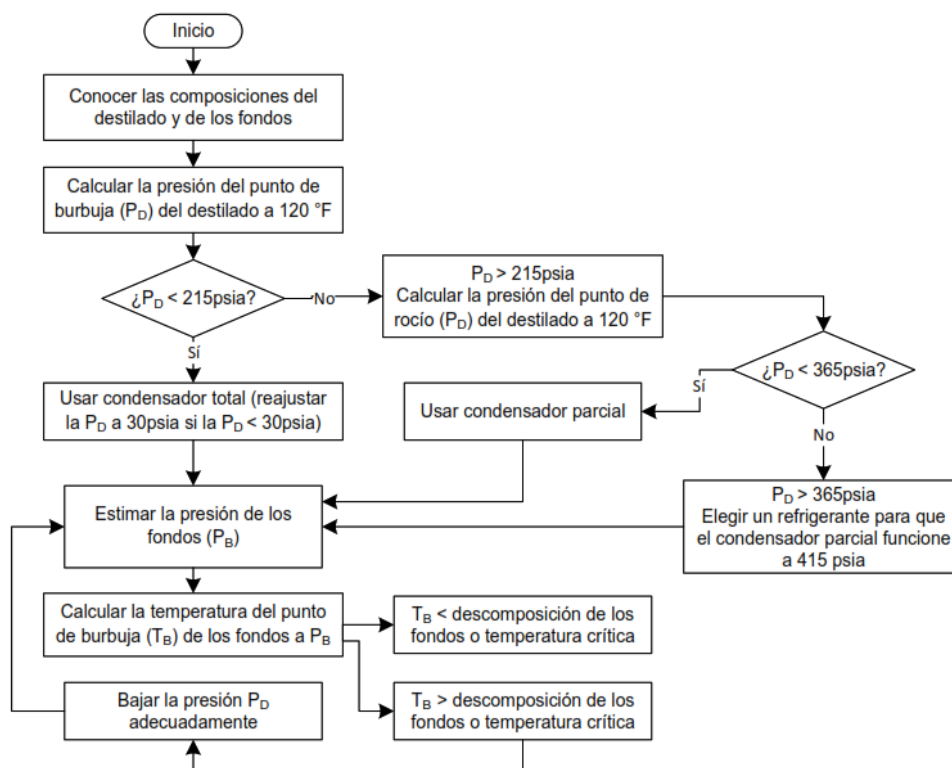
Los flujos molares para el proceso de separación son 154,7 kmol/h, 48,1 kmol/h y 194,688 kmol/h para el n-butano, trans-2-buteno y furfural respectivamente.

Con una recuperación del componente clave ligero de 96% y 4% de recuperación para el componente clave pesado (Seider et al., 2009).

Partiendo de un separador Flash en PRO/II, a 120 °F y fracción de vapor igual a cero, se determina la presión de ebullición del producto destilado aplicando el algoritmo para establecer la presión de la columna de destilación y el tipo de condensador de la Figura 7. Al Flash ingresa una corriente de alimentación a la misma temperatura y fracción de vapor, junto con las composiciones estimadas como producto del destilado y de los fondos conforme la recuperación de los componentes clave ligero y pesado.

### Figura 7

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 (3ra ed.) (p. 216), por (Seider et al., 2009)

Empleando las ecuaciones 5 y 6 (Seider et al., 2009), se hallan las presiones de condensador y de rehervidor, las mismas que se usarán en la columna de destilación “Shortcut”.

$$P_{\text{alimentacion}} = P_{\text{condensador}} + 70\text{kPa} \quad [ 5 ]$$

$$P_{\text{rehervidor}} = P_{\text{condensador}} + 70\text{kPa} \quad [ 6 ]$$

Se emplea una columna “Shortcut” en PRO II (Figura 8) para encontrar el número de platos, la razón de reflujo y el calor en el rehervidor. Se alimentan a la columna los flujos principales de separación junto con la presión de alimentación calculada anteriormente. Las especificaciones para dicha columna se presentan en la Figura 9.

### **Reflujo**

Previamente, para estimar el reflujo se encontró el destilado usando PRO/II, qué es el mismo encontrado por el algoritmo de la Figura 7 y usando la ecuación 7 (Treybal, 1988):

$$R = \frac{L}{D} \quad [ 7 ]$$

Donde,

R: Razón de reflujo

L: Reflujo

D: Destilado, líquido con el componente más volátil. El valor del destilado es 150,4360 kmol/h.

Figura 8

Columna Shortcut en PRO/II.

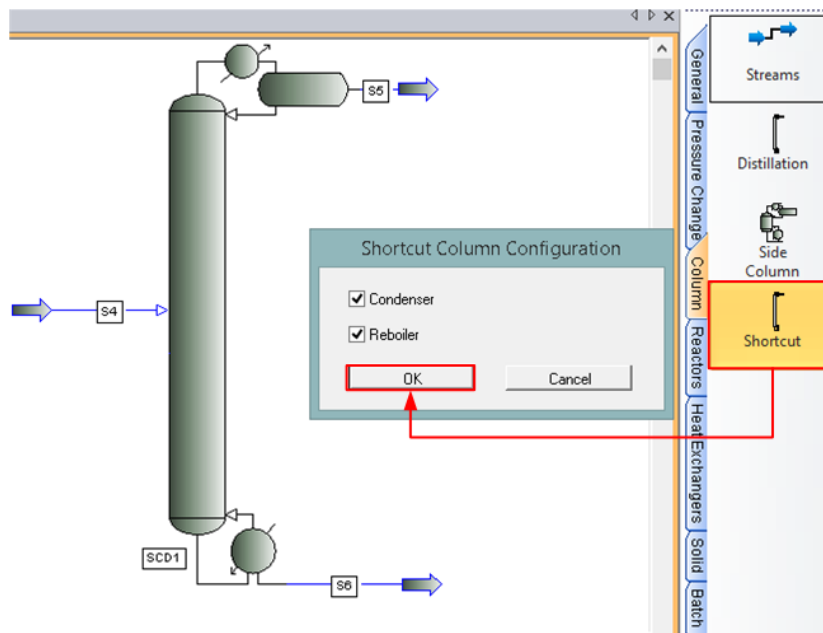


Figura 9

Especificaciones de la columna Shortcut en PRO/II.

**Shortcut Distillation - Minimum Reflux**

Perform Minimum Reflux Calculation

Minimum Reflux Calculations

Light Key: BUTANE

Heavy Key: T2BUTENE

Ratio to Minimum: 1.2

Reflux  
 Trays

**Shortcut Distillation - Specifications**

Specifications:

- SC1SPEC1 - Stream S5 Flowrate of component BUTANE through component T2BUTENE on a Wet basis in kg-mol/hr = 150.436 within the default tolerance
- SC1SPEC2 - Stream S6 Flowrate of component BUTANE on a Wet basis in kg-mol/hr = 6.188 within the default tolerance

**Shortcut Distillation - Products**

Product	Est. Type	Estimate	UOM	Phase	Pres. Type	Pressure	UOM
S5	Rate	150.436	kg-mol/hr	Liquid	Delta P	0	kPa
S6			kg-mol/hr	Liquid	Delta P	0	kPa

### **Costo de las especies químicas**

Como una restricción adicional se toma en cuenta el precio de venta en el mercado de los productos químicos candidatos a agentes separadores de masa y se comparan con el costo de compra del MSA ya establecido como solvente para la mezcla.

Los costos fueron obtenidos de Merck, (2022), donde se encuentra información general del producto como la descripción, aplicación, propiedades físicas y químicas básicas, ficha de datos de seguridad, entre otros. El costo toma en cuenta el estado y almacenamiento para distribución del producto, las especies se presentan en forma líquida y envasadas en botellas de vidrio.

Los mejores postulantes a agentes separadores de masa o MSA se eligen por sus convenientemente bajos costos en comparación al MSA que ya se reporta en la literatura.

### **Secuencia de destilación extractiva**

Seider et al. (2009) afirma que para lograr separar una mezcla se debe añadir una segunda fase al sistema en forma de agente arrastrador de masa o MSA, sin embargo, dicho proceso necesitará de una etapa adicional para poder recuperar el MSA y reciclarlo nuevamente al sistema. El objetivo es separar los productos finales como destilados mediante la separación por secuencia directa.

Para cumplir este último objetivo se simula el proceso de separación de las mezclas por destilación extractiva haciendo uso de dos unidades de separación, es decir, dos columnas de destilación "Shortcut" en PRO/II. Al proceso se alimentan los tres componentes, en este caso, n-butano, trans-2-buteno y 1,4-butanodiol.

La separación del componente más volátil se lleva a cabo en la primera columna de manera que el n-butano se extrae por el destilado y los fondos de esta primera unidad se envían a la segunda unidad. La primera columna “Shortcut” contará con las mismas especificaciones que se mencionaron en el apartado 3.5.2, mientras que la segunda columna “Shortcut”; alimentada por los fondos de la primera; tendrá las especificaciones de la Figura 10, donde el trans-2-buteno se retira como destilado y el MSA (1,4-butanodiol) se recupera de los fondos de esta segunda unidad y se recicla como una nueva corriente para mezclarse con la alimentación e ingresar una vez más al proceso. Los resultados de esta simulación se analizan en el capítulo cuatro del presente trabajo de investigación.

**Figura 10**

Especificaciones de la segunda columna Shortcut en PRO/II.

The figure displays three overlapping windows from the PRO/II software interface, illustrating the configuration for a Shortcut Distillation column. The windows are color-coded: red for 'Minimum Reflux', green for 'Specifications', and yellow for 'Products'.

**Minimum Reflux Window (Red):** Shows the 'Perform Minimum Reflux Calculation' checkbox checked. Under 'Minimum Reflux Calculations', the 'Light Key' is set to T2BUTENE and the 'Heavy Key' is set to ALLYLALCOHOL. The 'Ratio to Minimum' is set to Reflux with a value of 1.2.

**Specifications Window (Green):** Lists two specifications for Stream S5:
 

- Stream S4 Flowrate of component T2BUTENE through component ALLYLALCOHOL on a Wet basis in kg-mol/hr = 52.121 within the default tolerance.
- Stream S5 Flowrate of component T2BUTENE on a Wet basis in kg-mol/hr = 1.947 within the default tolerance.

**Products Window (Yellow):** Contains a table with the following data:

Product	Est. Type	Estimate	UOM	Phase	Pres. Type	Pressure	UOM
1 S4	Rate	52.121	kg-mol/hr	Liquid	Delta P	0	kPa
2 S5	Rate	1.947	kg-mol/hr	Liquid	Delta P	0	kPa

The background shows a process flow diagram with two distillation columns and associated streams.

## Capítulo IV

### Análisis y discusión de resultados

#### Introducción

En el presente capítulo se presentarán los resultados obtenidos a través del desarrollo del trabajo de titulación. En base a las restricciones de búsqueda y selección implementadas se muestran tablas de recopilación de datos, permitiendo el análisis y la comparación de estos.

#### Extracción de datos

De la base de datos de PRO/II se consideró setenta y cuatro especies con masa molecular en el rango de 1 – 100 g/mol y que se encuentran en fase líquida a 37,8°C y 10,2 atm. La fase líquida es uno de los requerimientos para la destilación que emplea un agente separador de masa (“MSA” por sus siglas en inglés), que es la destilación extractiva (Albright, 2009).

Cabe mencionar que los MSA se tienen que buscar únicamente en alcoholes, aldehídos, amidas y aminas (Seader et al., 2010).

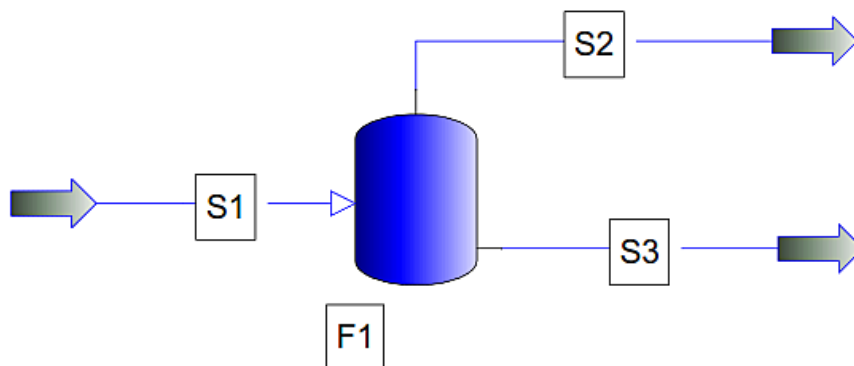
Con el empleo de un separador Flash (Figura 11) y paquete termodinámico SRK (AVEVA, 2020); (Gil Chaves et al., 2016), se determinó la fase en la que se encuentran las especies a las condiciones de operación de temperatura y presión antes mencionadas.

Los resultados de esta simulación se indican en la Tabla 3, donde se demuestra que, en la parte inferior a la salida del separador Flash, corriente S3, salen los componentes líquidos.



**Figura 11**

*Determinación de la fase de los componentes, separador Flash en PRO/II.*

**Tabla 3**

*Tabla de propiedades de los componentes (acetaldehído).*

Nombre de la corriente	S1	S3
Temperatura (°C)	37,8	37,8
Presión (atm)	10,2	10,2
Flujo (kgmol/h)	1	1
Sistema termodinámico	SRK	SRK
Composición acetaldehído	1	1
Fase a 37,8°C y 10,2 atm	Líquido	Líquido

*Nota.* Resultados obtenidos de PRO/II.

La Figura 12 muestra la ventana de PRO/II de la lista de componentes resultantes a estas restricciones de masa molecular, de fase líquida, y de tipo de molécula orgánica, las cuales son 74 especies químicas, y se presentan en la Tabla 4.

Figura 12

Ventana de la base de datos de componentes de PRO/II.

Component Selection - List/Search

UOM Range Help

Component Databank:

- All Component Banks
- All Component - Databank Hierarchy
- All Components - SIMSCI Bank
- All Components - PROCESS Bank (old compatibility)
- PROII\_10.2:PSRKTCP
- Bio-Lib\_10.2:BioETHNL
- Bio-Lib\_10.2:BioFUELS
- DIPPR10.2:DIPPR
- Hydrocarbon Lightends
- Acids
- Additional Electrolyte Components
- Alcohols
- Aldehydes

Sort/Search by:

Full Name  Chemical Formula

SIMSCI Name/Alias  CAS Number

Search String:

Component Full Name:	SIMSCI Name/Alias:	Formula:	CAS Number:
Acetaldehyde	ACETALD	C2H4O	75-07-0
trans-Crotonaldehyde	CRTA	C4H6O	123-73-9
Formaldehyde	FORMALD	CH2O	50-00-0
Furfuraldehyde	FURFURAL	C5H4O2	98-01-1
Glyoxal	GLYOXAL	C2H2O2	107-22-2
Isobutyraldehyde	IBUTALD	C4H8O	78-84-2
Methacrolein	MACR	C4H6O	78-85-3
Pentanal	VALRALD	C5H10O	110-62-3
trans-2-Pentenal	3ECR	C5H8O	1576-87-0
Acetamide	ACTAMIDE	C2H5NO	60-35-5
Acrylamide	ACRYAMDI	C3H5NO	79-06-1
N,N-Dimethylacetamide	DIMA	C4H9NO	127-19-5
n,n-Dimethylformamide	DMF	C3H7NO	68-12-2
Formamide	FORMAMID	CH3NO	75-12-7
N-Methylacetamide	NMAMIDE	C3H7NO	79-16-3
N-Methylformamide	NMF	C2H5NO	123-39-7
Acetol	ACETOL	C3H6O2	116-09-6
Allyl Alcohol	AA	C3H6O	107-18-6
1-Amino-2-Propanol	IPAA	C3H9NO	78-96-6
3-Amino-1-Propanol	PRAA	C3H9NO	156-87-6
1,2-Butanediol	12BD	C4H10O2	584-03-2
1,3-Butanediol	13BD	C4H10O2	107-88-0
1,4-Butanediol	14BD	C4H10O2	110-63-4
2,3-Butanediol	23BD	C4H10O2	513-85-9
1-Butanol	BUTANOL	C4H10O	71-36-3
2-Butanol	SBUTANOL	C4H10O	78-92-2
cis-2-Butene-1,4-Diol	C2BDIOL	C4H8O2	6117-80-2
2-Chloroethanol	CLEA	C2H5ClO	107-07-3
Cyclopentanol	CYPNTNOL	C5H10O	96-41-3
Dimethylethanolamine	DMEETAM	C4H11NO	108-01-0
2,2-Dimethyl-1-Propanol	22M1	C5H12O	75-84-3
2,3-Epoxy-1-Propanol	GLYCIDE	C3H6O2	556-52-5
Ethanol	ETHANOL	C2H6O	64-17-5
2-Ethoxyethanol	EXEA	C4H10O2	110-80-5
Ethylene Glycol	EG	C2H6O2	107-21-1
Furfuryl Alcohol	2HMF	C5H6O2	98-00-0
Glycerol	GLYCEROL	C3H8O3	56-81-5
Isopropanol	IPROPNOL	C3H8O	67-63-0
Methanol	METHANOL	CH4O	67-56-1
2-Methoxyethanol	MXEA	C3H8O2	109-86-4
2-Methoxy-1-Propanol	MOXYPROH	C4H10O2	1589-47-5
2-Methyl-1-Butanol	2M1B	C5H12O	137-32-6
2-Methyl-2-Butanol	2M2B	C5H12O	75-85-4
3-Methyl-1-Butanol	3M1B	C5H12O	123-51-3
3-Methyl-2-Butanol	3M2B	C5H12O	598-75-4
Methylethanolamine	MEETAM	C3H9NO	109-83-1
2-Methyl-1-Propanol	IBUTANOL	C4H10O	78-83-1
1-Pentanol	PENTANOL	C5H12O	71-41-0
2-Pentanol	2PENTNOL	C5H12O	6032-29-7

**Tabla 4**

*Componentes de la base de datos de PRO/II con masa molecular menor a 100 g/mol, en fase líquida a 37,8 °C y 10,2 atm, y que son alcoholes, aldehídos, aminas o amidas.*

	<b>Componente</b>	<b>Masa Molecular (g/mol)</b>
1	Acetaldehído	44,05
2	trans-Crotonaldehído	70,08
3	Formaldehído	30,02
4	Furfural	96,08
5	Glioxal	58,03
6	Isobutiraldehído	72,1
7	Metacroleína	70,08
8	Pentanal	86,13
9	trans-2-pentenal	84,11
10	Acetamida	59,06
11	Acrilamida	71,07
12	n,n-Dimetilacetamida	87,12
13	n,n-Dimetilformamida	73,09
14	Formamida	45,04
15	n-Metilacetamida	73,09
16	n-Metilformamida	59,06
17	Acetol	74,07
18	Alcohol Alílico	58,07
19	1-Amino-2-Propanol	75,1
20	3-Amino-1-Propanol	75,1
21	1,2-Butanodiol	90,12

	<b>Componente</b>	<b>Masa Molecular (g/mol)</b>
22	1,3-Butanodiol	90,12
23	1,4-Butanodiol	90,12
24	2,3-Butanodiol	90,12
25	1-Butanol	74,12
26	2-Butanol	74,12
27	cis-2-Buteno-1,4-diol	88,1
28	2-Cloroetanol	80,51
29	Ciclopentanol	86,13
30	Dimetiletanolamina	89,13
31	2,2-Dimetil-1-Propanol	88,14
32	2,3-Epoxi-1-Propanol	74,07
33	Etanol	46,06
34	2-Etoxietanol	90,12
35	Etilenglicol	62,06
36	Alcohol Furfurílico	98,09
37	Glicerol	92,09
38	Isopropanol	60,09
39	Metanol	32,04
40	2-Metoxietanol	76,09
41	2-Metoxi-1-Propanol	90,12
42	2-Metil-1-Butanol	88,14
43	2-Metil-2-Butanol	88,14
44	3-Metil-1-Butanol	88,14
45	3-Metil-2-Butanol	88,14

	<b>Componente</b>	<b>Masa Molecular (g/mol)</b>
46	Metiletanolamina	75,1
47	2-Metil-1-Propanol	74,12
48	1-Pentanol	88,14
49	2-Pentanol	88,14
50	3-Pentanol	88,14
51	1-Propanol	60,09
52	Alcohol Propargílico	56,06
53	1,2-Propilenglicol	76,09
54	1,3-Propilenglicol	76,09
55	Alilamina	57,09
56	Anilina	93,12
57	n-Butilamina	73,13
58	sec-Butilamina	73,13
59	ter-Butilamina	73,13
60	Ciclohexilamina	99,17
61	Ciclopentilamina	85,14
62	Dialilamina	97,15
63	Dietilamina	73,13
64	Dimetilamina	45,08
65	Etanolamina	61,08
66	Etilamina	45,08
67	Isobutilamina	73,13
68	Isopropilamina	59,11
69	Metilamina	31,05

	<b>Componente</b>	<b>Masa Molecular (g/mol)</b>
70	Morfolina	87,12
71	n-Pentilamina	87,16
72	Piperazina	86,13
73	1,2-Propanodiamina	74,12
74	n-Propilamina	59,11

El furfural se reporta como agente arrastrador líquido de la mezcla n-butano y trans-2-buteno (Seider et al., 2009).

### **Factor de Separación**

Considerando un factor de separación mayor que el de la mezcla butano – trans-2-buteno – furfural, de la Tabla 4 se obtuvieron cuatro especies químicas consideradas candidatas a MSA 1,4-butanodiol, etilenglicol, glicerol, 1,2-propilenglicol (Tabla 5). Cabe enfatizar que el factor de separación también se conoce como volatilidad relativa ( Seider et al., 2009).

Para encontrar el valor de la volatilidad relativa, en primer lugar, en PRO/II se hallaron los valores de K de los componentes de la mezcla n-butano y trans-2-buteno sin considerar ningún MSA, como se evidencia en la Figura 13. Luego, se obtuvieron los valores de K correspondientes a la mezcla considerando el MSA, como se muestra en la Figura 14, es decir, n-butano – trans-2-buteno – furfural.

El factor de separación es un parámetro que describe la facilidad de separación entre dos especies químicas. Más fácil será la separación de especies químicas con el aumento del valor del factor de separación.

Siendo la destilación ordinaria aplicable para valores de  $\alpha > 1,05$  (Biegler et al., 1997) o  $\alpha > 1,0$  (Seider et al., 2009) Los valores de volatilidad relativa de los componentes determinan si son componentes clave ligeros y pesados, donde el componente clave ligero es el más volátil.

### Figura 13

Valores de  $K$  obtenidos de PRO/II para la mezcla *n*-butano y *trans*-2-buteno.

```

SIMSCI                                R
PROJECT                               PRO/II PROCESS ENGINEERING 10.2 (64 bit)
PROBLEM                               OUTPUT
                                       FLASH DRUM SUMMARY
=====
FLASH ID                               F1
NAME
FEEDS                                  S1
PRODUCTS VAPOR                         S2
          LIQUID                        S3

TEMPERATURE, C                         37.800
PRESSURE, ATM                           10.200
PRESSURE DROP, ATM                       0.000
MOLE FRAC VAPOR                          0.00000
MOLE FRAC LIQUID                          1.00000
MOLE FRAC MW SOLID                       0.00000
DUTY, M*KCAL/HR                          0.00000
FLASH TYPE                               ISOTHERMAL

VAPOR-LIQUID COMPOSITIONS AND K-VALUES FOR UNIT 1, 'F1'
-----
      COMPONENT          VAPOR (1)          LIQUID          K-VALUE
-----
      1 BUTANE           0.21550           0.50000       4.3101E-01
      2 T2BUTENE        0.20681           0.50000       4.1362E-01
(1) SUBCOOLED LIQUID, VAPOR SUM NOT EQUAL 1.0

```

$$\alpha_{1,2} = \frac{0,43101}{0,41362} = 1,0420434$$

[ 8]

Figura 14

Valores de  $K$  obtenidos de PRO/II para la mezcla *n*-butano y *trans*-2-buteno y el furfural como MSA.

```

SIMSCI                               R
PROJECT          PRO/II PROCESS ENGINEERING 10.2 (64 bit)
PROBLEM                                OUTPUT
                                           FLASH DRUM SUMMARY
=====
FLASH ID                               F1
  NAME
FEEDS                                   S1
PRODUCTS VAPOR                          S2
          LIQUID                          S3

TEMPERATURE, C                          37.800
PRESSURE, ATM                             10.200
PRESSURE DROP, ATM                        0.000
MOLE FRAC VAPOR                           0.00000
MOLE FRAC LIQUID                           1.00000
MOLE FRAC MW SOLID                         0.00000
DUTY, M*KCAL/HR                           0.00000
FLASH TYPE                                ISOTHERMAL

VAPOR-LIQUID COMPOSITIONS AND K-VALUES FOR UNIT 1, 'F1'

  COMPONENT          VAPOR (1)          LIQUID          K-VALUE
-----
  1  BUTANE          0.17923          0.33333        5.3770E-01
  2  T2BUTENE       0.15798          0.33333        4.7393E-01
  3  FURFURAL       6.9330E-04       0.33333        2.0799E-03

(1) SUBCOOLED LIQUID, VAPOR SUM NOT EQUAL 1.0

```

$$\alpha_{1,2} = \frac{0,53770}{0,47393} = 1,1345557 \quad [9]$$



Con los valores obtenidos en el software se determinaron los valores de la volatilidad relativa ( $\alpha$ ) dividiendo únicamente los valores de K de los componentes de la mezcla con y sin MSA (ecuaciones 8 y 9). Los resultados de dicho cálculo se indican en la Tabla 5.

**Tabla 5**

*Volatilidad relativa ( $\alpha$ ) de las especies químicas candidatas a MSA.*

	<b>Componente</b>	<b><math>\alpha</math></b>
<b>Mezcla n-butano y trans-2-buteno</b>		
	n-Butano y trans-2-buteno	1,0420
1	Furfural	1,1346
2	1,4-Butanodiol	1,2202
3	Etilenglicol	1,1889
4	Glicerol	1,2421
5	1,2-Propilenglicol	1,2029

En las heurísticas para el diseño de procesos de separación, Biegler et al. (1997) reporta que se tiene que usar la destilación extractiva si la volatilidad relativa entre los componentes clave es al menos 6 veces mayor que la correspondiente para la destilación ordinaria. Sin embargo, los valores de volatilidad relativa de los componentes de referencia no cumplen lo indicado por dicha referencia. Por tanto, en la búsqueda de MSAs se omite lo sugerido por este último autor.

Por otra parte, como mostrado en la Tabla 5, las especies químicas 2 a 5 presentan valores de  $\alpha$  mayores que la mostrada por la especie química 1.

Se puede concluir que para la mezcla n-butano y trans-2-buteno, el 1,4-butanodiol, etilenglicol, glicerol y 1,2-propilenglicol promoverán una separación más fácil que la del furfural, siendo el glicerol la especie más destacable como agente separador de masa entre las demás especies.

### Toxicidad e inflamabilidad

Para poder establecer las mejores opciones de MSA en términos de la toxicidad e inflamabilidad, como referencia se consideró los valores correspondientes del furfural usado en la separación del n-butano y trans-2-buteno (Seider et al., 2009). La toxicidad (X) y la Inflamabilidad (F) se muestran en la Tabla 6.

**Tabla 6**

*Valores de toxicidad (X) e inflamabilidad (F) de las especies químicas candidatas a MSA.*

<b>Componente</b>	<b>X</b>	<b>F</b>
<b>Mezcla n-butano y trans-2-buteno</b>		
Furfural	3,467	0,732
1,4-Butanodiol	1,361	0,614
Etilenglicol	0,468	0,628
Glicerol	0,408	0,643
1,2-Propilenglicol	0,791	0,622

El agente arrastrador de referencia, furfural, se encuentra en el rango “fuertemente inflamable” entre 0,6 y 0,8 (Kondo et al., 2001), al igual que el índice F de las especies candidatas, sin embargo, los valores de inflamabilidad son menores al valor de la especie referencia, destacando al 1,4-butanodiol como menos inflamable de entre las demás especies.

Los valores X de toxicidad (Martin & Young, 2001) para los MSA encontrados son mucho menores que el valor hallado para la especie química de referencia, destacando al glicerol como el menos tóxico de entre las demás especies candidatas a agentes separadores de masa.

### Número de platos, razón de reflujo, calor en el rehervidor y reflujo

Para poder estudiar el efecto del MSA en la separación de las especies químicas de cada mezcla se consideró el número de platos, la razón de reflujo, el flujo de calor en el rehervidor, y el reflujo.

Con el algoritmo para establecer la presión de la columna de destilación (Seider et al., 2009) y el uso de un separador Flash se estimó las presiones de alimentación, condensador y rehervidor de la columna "Shortcut". Dicho procedimiento se muestra en la Figura 15. Los resultados de la simulación de la separación de la mezcla en la columna "Shortcut", para composiciones de las especies en cada corriente, se observan en las Tablas 7 y 8, para la mezcla con y sin MSA, respectivamente. Así mismo los valores resultantes para el número de platos, la razón de reflujo y el calor en el rehervidor se muestran en las Figuras 16 y 17 de las ventanas del reporte proporcionado por PRO/II.

**Tabla 7**

*Resultados de la simulación de la mezcla n-butano – trans-2-buteno.*

<b>Nombre de la corriente</b>	S1	S3	S4	S5	S6
<b>Fase</b>	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido
<b>Temperatura (°F)</b>	120,000	120,000	125,016	124,758	125,992
<b>Presión (kPa)</b>	485,560	485,560	520,560	520,560	520,560
<b>Flujo (kgmol/h)</b>	150,440	150,440	202,800	150,436	52,364
<b>Composición n-butano</b>	0,987	0,987	0,763	0,987	0,118
<b>Composición trans-2-buteno</b>	0,013	0,013	0,237	0,013	0,882

Figura 15

Separador Flash y columna Shortcut en PRO/II.

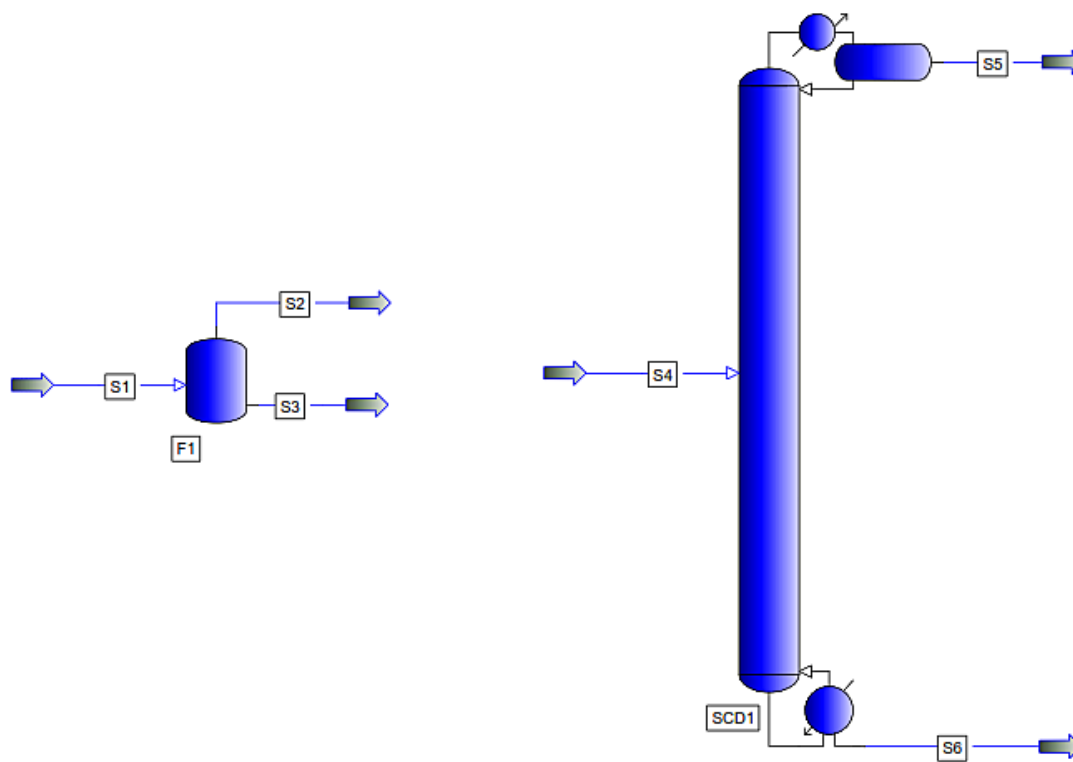


Tabla 8

Resultados de la simulación de la mezcla *n*-butano – *trans*-2-buteno con furfural como MSA.

Nombre de la corriente	S1	S3	S4	S5	S6
Fase	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido
Temperatura (F)	120,000	120,000	151,124	124,758	201,878
Presión (kPa)	485,560	485,560	520,560	520,560	520,560
Flujo (kgmol/h)	150,440	150,440	397,490	150,436	247,054
Composición <i>n</i> -butano	0,987	0,987	0,389	0,987	0,025
Composición <i>trans</i> -2-buteno	0,013	0,013	0,121	0,013	0,187
Composición furfural	0	0	0,490	0	0,788

Figura 16

Valores del número de platos, razón de reflujo y calor del rehervidor obtenidos de PRO/II para la mezcla n-butano y trans-2-buteno.

```

Shortcut Column 'SCD1'

<PRE>
FEEDS

  STREAM      PHASE
  -----
S4           LIQUID
PRODUCTS

          ----- TOTAL STREAM RATES -----
          MOLES      WEIGHT      LIQUID VOL      NORM VAPOR(1)      NUM
STREAM + PHASE  KG-MOL/HR      KG/HR      M3/HR      M3/HR      SECTION TRAYS
-----
S5           L      150.44      8739.97      14.95      3371.87      1  350.37
S6           L       52.36      2950.49       4.86      1173.69

TOTALS              202.80      11690.46      19.80      4545.56              350.37
SPECIFICATIONS

  PARAMETER      COMP.      SPECIFICATION      SPECIFIED      CALCULATED
  TYPE              NUM              TYPE              VALUE              VALUE
-----
STRM S5              1- 2      MOL RATE              1.504E+02      1.504E+02
STRM S6              1          MOL RATE              6.188E+00      6.189E+00
SUMMARY OF UNDERWOOD CALCULATIONS

MINIMUM REFLUX RATIO      68.09052
FEED CONDITION Q          1.00000
FENSKE MINIMUM TRAYS      350.36900
OPERATING REFLUX RATIO    1.20 * R-MINIMUM

TOTAL   FEED   R/R-MIN   M/M-MIN   REFLUX   DUTY, M*KJ/HR
TRAYS  TRAY                RATIO      CONDENSER   REBOILER
-----
770 471.63      1.100      2.198      74.900      -2.247E+02      2.247E+02
715 437.80      1.150      2.040      78.304      -2.348E+02      2.348E+02
671 410.75      1.200      1.914      81.709      -2.448E+02      2.448E+02
634 388.64      1.250      1.811      85.113      -2.549E+02      2.549E+02
604 370.22      1.300      1.725      88.518      -2.650E+02      2.650E+02

```

Nota. Los datos más relevantes de esta figura se resumen en la Tabla 9.

Figura 17

Valores del número de platos, razón de reflujo y calor del rehervidor obtenidos de PRO/II para la mezcla *n*-butano y *trans*-2-buteno y el furfural como MSA.

```

Shortcut Column 'SCD1'

<PRE>
FEEDS

  STREAM      PHASE
  -----
S4
PRODUCTS
  STREAM      PHASE

-----
TOTAL STREAM RATES -----
STREAM + PHASE    MOLES      WEIGHT      LIQUID VOL    NORM VAPOR(1)    NUM
                   KG-MOL/HR    KG/HR       M3/HR         M3/HR            SECTION TRAYS
-----
S5                L          150.44      8739.98       14.95          3371.87          1    39.05
S6                L          247.05      21657.34      20.92          5537.47
-----
TOTALS            397.49      30397.32      35.87          8909.34          39.05
SPECIFICATIONS

  PARAMETER      COMP.    SPECIFICATION    SPECIFIED    CALCULATED
  TYPE           NUM      TYPE              VALUE         VALUE
-----
STRM S5          1- 2    MOL RATE         1.504E+02    1.504E+02
STRM S6          1      MOL RATE         6.188E+00    6.184E+00
SUMMARY OF UNDERWOOD CALCULATIONS

MINIMUM REFLUX RATIO    13.62756
FEED CONDITION Q        1.00000
FENSKE MINIMUM TRAYS    39.05199
OPERATING REFLUX RATIO  1.20 * R-MINIMUM

TOTAL    FEED    R/R-MIN    M/M-MIN    REFLUX    DUTY, M*KJ/HR
TRAYS    TRAY                RATIO      CONDENSER  REBOILER
-----
88  46.88    1.100      2.245      14.990    -4.734E+01  4.794E+01
82  43.59    1.150      2.088      15.672    -4.935E+01  4.996E+01
77  40.94    1.200      1.961      16.353    -5.137E+01  5.198E+01
72  38.76    1.250      1.856      17.034    -5.339E+01  5.399E+01
69  36.93    1.300      1.769      17.716    -5.540E+01  5.601E+01

```

Nota. Los datos más relevantes de esta figura se resumen en la Tabla 9.

Evaluando estos criterios para la mezcla y sus distintos candidatos a agentes separadores de masa se obtiene el resumen general mostrado en la Tabla 9. En esta última Tabla, la columna N representa los platos totales de la "Shortcut", la columna R indica la razón de reflujo, la columna  $Q_r$  muestra los flujos de calor en el rehervidor y la columna L presenta el reflujo.

Este último parámetro de reflujo se obtiene por multiplicación de la razón de reflujo (columna R) y el destilado, que es igual a 150,4360 kmol/h.

**Tabla 9**

*Número de platos N, razón de reflujo R, calor en el rehervidor y reflujo L para la mezcla sin MSA y para la mezcla en función de las especies candidatas a MSA.*

Componente	N	R	$Q_r$ (m <sup>3</sup> J/h)	L (kmol/h)
<b>Mezcla n-butano y trans-2-buteno</b>				
N-Butano y trans-2-buteno	671	81,7	244,8	12292
Furfural	77	16,4	52	2460,1
1,4-Butanodiol	26	5,5	18,2	829,2
Etilenglicol	20	4	12,8	599,6
Glicerol	17	3,1	10,1	462,1
1,2-Propilenglicol	19	4,1	12,4	610,9

*Nota.* los MSA enlistados en la presente tabla no sugieren un orden específico de aplicación.

De acuerdo con Luyben (2013) para que una separación sea llevada a cabo más fácilmente se requerirán menos platos en la columna y la razón de reflujo debe ser menor, y habrá un menor consumo de energía. Lo mencionado por este último autor se puede evidenciar en los resultados que muestra la Tabla 9 para la separación de la mezcla con los MSA de estudio.

Así mismo, con respecto al flujo de calor generado por el rehedidor será menor por tanto requerirá menos energía para llevar a cabo la separación. Por tanto, las especies analizadas en este estudio califican como opción óptima en la destilación extractiva de la mezcla.

### Costos de las especies químicas

La Tabla 10 muestra el costo de compra (Merck, 2022) de las mejores opciones de MSA determinadas en el análisis del número de platos N, razón de reflujo R, calor en el rehedidor Qr y reflujo L.

**Tabla 10**

*Costo de las especies químicas candidatas a MSA.*

Componente	Costo Merck
<b>Mezcla n-butano y trans-2-buteno</b>	
Furfural <sup>a</sup>	\$127,20 x 1L
1,4-Butanodiol	\$38,80 x 1 L
Etilenglicol	\$100,00 x 1 L
Glicerol	\$68,50 x 1 L
1,2-Propilenglicol <sup>b</sup>	\$81,16 x 1 L

<sup>a</sup> costo por litro determinado en función de \$63.60 x 500 ml.

<sup>b</sup> costo por litro determinado en función de \$84,10 x 1 Kg ( $\rho=1,036\text{g/cm}^3$ ).

Los costos para las especies encontradas, por litro de materia prima, son menores que el costo de compra de la especie química de referencia, en especial, el glicerol.



Las especies químicas, 1,4-butanodiol, etilenglicol, glicerol y 1,2-propilenglicol, estudiadas y analizadas como candidatas a agentes separadores de masa en la destilación extractiva de la mezcla, n-butano y trans-2-buteno, son las mejores opciones de MSA puesto que cumplen con todas las restricciones expuestas en el presente trabajo, tomando en cuenta al glicerol como la especie que más se destaca de entre los cuatro MSA estudiados.

### Simulación de la destilación extractiva en PRO/II

La simulación de la separación de la mezcla con su respectivo agente separador de masa se realizó en el software PRO/II, usando dos columnas Shortcut, como se observa en la Figura 18. En relación con la separación de la primera columna SCD1 como producto del destilado se obtiene el n-butano, mientras que los fondos están constituidos por trans-2-buteno y el glicerol. Estas últimas dos especies químicas se envían a la segunda columna SCD2 donde se extrae como destilado al trans-2-buteno y el glicerol se recupera de los fondos para ser recirculado a la primera columna. Los resultados de la simulación se presentan en la Tabla 11.

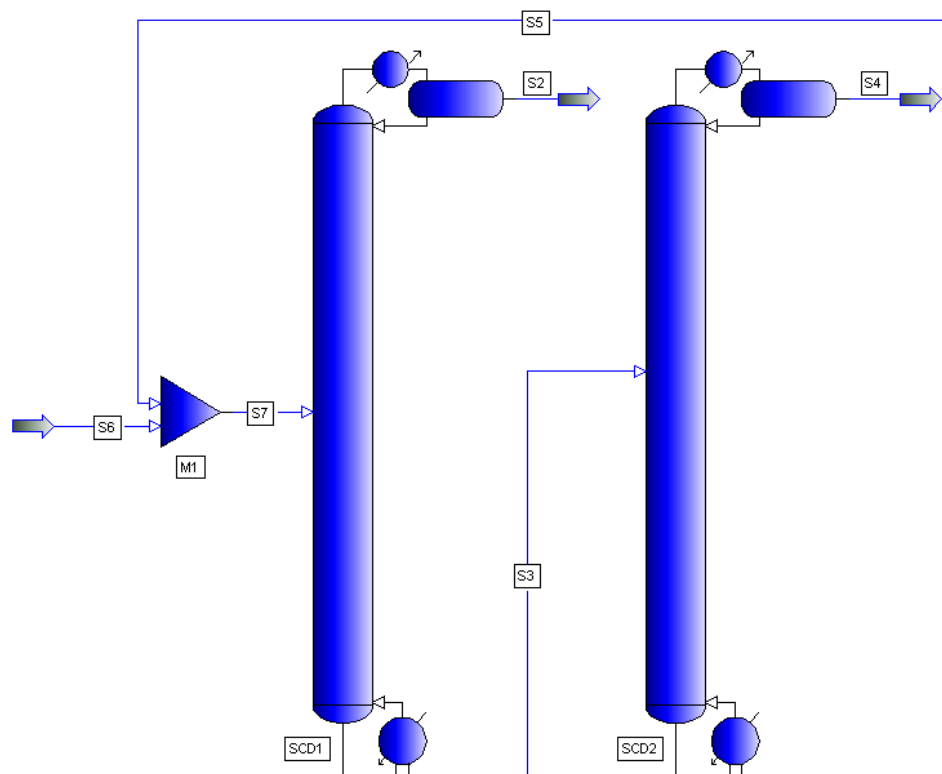
**Tabla 11**

*Resultados de la separación de la mezcla n-butano y trans-2-buteno con glicerol como agente separador de masa.*

Nombre de la corriente	S2	S3	S4	S5	S6	S7
<b>Fase</b>	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido
<b>Temperatura (°F)</b>	124,758	201,879	134,925	426,609	127,799	203,320
<b>Presión (kPa)</b>	520,560	520,560	520,560	530,560	520,560	520,560
<b>Flujo (kg mol/h)</b>	150,436	247,053	58,095	188,958	208,530	397,489
<b>Composición n-butano</b>	0,987	0,025	0,103	0,001	0,741	0,389
<b>Composición trans-2-buteno</b>	0,013	0,187	0,763	0,010	0,222	0,121
<b>Composición glicerol</b>	0	0,788	0,134	0,989	0,037	0,490

**Figura 18**

Separación en PRO/II de la mezcla *n*-butano y *trans*-2-buteno con glicerol.



Según los resultados evidenciados en la corriente S2 la fracción líquida del *n*-butano es 0,987 separada en la primera columna y la fracción líquida del *trans*-2-buteno (corriente S4) es 0,763 y una composición de recirculación al sistema del agente separador de masa, en este caso glicerol, de 0,989.

## Capítulo V

### Conclusiones y recomendaciones

#### Conclusiones

- La aplicación del marco de proceso de desarrollo de productos establece que las restricciones de búsqueda y selección de especies planteadas en este trabajo suponen una contribución a los criterios ya existentes.
- Se encontró especies candidatas que obtuvieron mejores resultados como agentes separadores de masa que la reportada en la literatura, de las 74 especies analizadas el glicerol es el más factible.
- La volatilidad relativa del 1,4-butanodiol, etilenglicol, glicerol, 1,2-propilenglicol señala que las especies promoverán una separación más fácil que la del furfural con valores mayores a 1,05 de factor de separación, con valores de 1,2202, 1,1889, 1,2421 y 1,2029 respectivamente.
- La evaluación de toxicidad e inflamabilidad muestra que las especies estudiadas son menos tóxicas e inflamables que el furfural. Con valores para el glicerol como agente separador de masa destacado de 0,408 de toxicidad e inflamabilidad de 0,643.
- El costo de compra de las especies candidatas resultó ser menor que el costo de la especie reportada en la literatura, siendo el glicerol \$58,70 menos costoso que el furfural.
- El sistema de separación simulado arrojó óptimos resultados de las especies estudiadas. Con 17 platos, 3,1 de razón de reflujo, 462,1 kmol/h de reflujo y 10,1 mJ/h de calor que fluye en el rehervidor para el glicerol.

## Recomendaciones

- Sería conveniente analizar las restricciones de búsqueda y selección presentadas en muestras o bases de datos más representativas.
- Se propone realizar una prueba piloto de la separación de las especies químicas.
- Evaluar la mezcla con el agente separador obtenido bajo condiciones experimentales con el fin de comparar los resultados con las propiedades teóricas presentadas.

## Bibliografía

- Albright, L. (2009). *Albright's chemical engineering handbook*. CRC Press.
- AVEVA. (2020, May 27). *Simulation Thermodynamic Data Keyword Manual*.  
<https://www.aveva.com/>
- Bagajewicz, M., & Manousiouthakis, V. (1992). Mass/Heat-Exchange Network Representation of Distillation Networks. *AIChE Journal*, 38(11), 1769–1800.  
<https://doi.org/10.1002/aic.690381110>
- Bagnato, G., Iulianelli, A., Sanna, A., & Basile, A. (2017). Glycerol Production and Transformation: A Critical Review with Particular Emphasis on Glycerol Reforming Reaction for Producing Hydrogen in Conventional and Membrane Reactors. *MDPI*, 7(2), 1–31. <https://doi.org/10.3390/MEMBRANES7020017>
- Biegler, L. T., Grossmann, I. E., & Westerberg, A. W. (1997). *Systematic Methods of Chemical Process Design*. Prentice Hall PTR.
- Cavani, F., Albonetti, S., Basile, F., & Gandini, A. (2016). *Chemicals and Fuels from Bio-Based Building Blocks*. John Wiley & Sons, Inc.
- Chien, I., Wang, C., & Wong, D. (1999). Dynamics and control of a heterogeneous azeotropic distillation column: conventional control approach. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 38(2), 468–478. <https://doi.org/10.1021/ie980269f>
- Cooper, R. G. (2011). *Winning at new products: Creating value through innovation*. Basic Books.
- Fortes, D., & Suard, E. (2011). Crystal structures of ethylene glycol and ethylene glycol monohydrate. *J. Chem. Phys.* <https://doi.org/10.1063/1.3668311>
- Fredenslund, A., & Rasmussen, P. (1986). Separations from Dilute Solutions: Group-contribution methods. *Fluid Phase Equilibria*, 27, 347–372. [https://doi.org/10.1016/0378-3812\(86\)87059-5](https://doi.org/10.1016/0378-3812(86)87059-5)
- Geankoplis, C. (2006). *Procesos de transporte y principios de procesos de separación* (4th ed.). CECSA.
- Ghasem, N. (2021). *Computer methods in chemical engineering*. CRC Press.

- Gil Chaves, I., Guevara, J., García, J., Leguizamón, A., & Rodríguez, G. (2016). *Process Analysis and Simulation in Chemical Engineering*. Springer. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-14812-0>
- Jiménez, A. (2003). *Diseño de procesos en ingeniería química*. Reverté.
- Kister, H., Haas, J., Hart, D., & Gill, D. (1992). *Distillation design*. McGraw Hill.
- Kondo, S., Urano, Y., Tokuhashi, K., Takahashi, A., & Tanaka, K. (2001). Prediction of flammability of gases by using F-number analysis. *Journal of Hazardous Materials*, *82*(2), 113–128. [https://doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/S0304-3894\(00\)00358-7](https://doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/S0304-3894(00)00358-7)
- Lee, J. A., Ahn, J. H., & Lee, S. Y. (2019). Organic Acids: Succinic and Malic Acids. *Comprehensive Biotechnology*, 172–187. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-64046-8.00159-2>
- Lei, Z., Chen, B., & Li, J. (2003). Process design for separating C4 mixtures by extractive distillation. *CjChE*, *11*(3), 297–301.
- Lei, Z., Li, C., & Chen, B. (2003). Extractive Distillation: A Review. *Separation & Purification Reviews*, *32*(2), 121–213. <https://doi.org/10.1081/SPM-120026627>
- Li, L., Zhou, R., Dong, H., & Grossman, I. (2011). Separation network design with mass and energy separating agents. *Computers & Chemical Engineering*, *35*(10), 2005–2016. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2010.10.013>
- López, D. (2018). *Criterios de selección para un agente material de separación en un proceso de deshidratación de etanol por destilación extractiva*. *4*(1).
- Luyben, W. (2013). *Distillation Design and Control Using Aspen Simulation* (2nd ed.). John Wiley & Sons, Inc.
- Martin, T. M., & Young, D. M. (2001). Prediction of the Acute Toxicity (96-h LC50) of Organic Compounds to the Fathead Minnow (pimephales promelas) Using a Group Contribution Method. *Chem. Res. Toxicol.*, *14*(10), 1378–1385. <https://doi.org/10.1021/tx0155045>
- Matar, S., & Hatch, L. F. (2000). *Chemistry of petrochemical processes* (2nd ed). Gulf Publishing Company.
- Merck. (2022). *Merck*. <https://www.sigmaaldrich.com/EC/es>

- Naeem, M., Al-Rabiah, A., & Mughees, W. (2014). Process simulation of 1-butene and n-butane separation by extractive distillation. *International Journal of Engineering Research & Technology*, 3(6), 747–750.
- Raimondo, S., Mineau, P., & Barron, M. (2007). Estimation of Chemical Toxicity to Wildlife Species Using Interspecies Correlation Models. *Environmental Science & Technology*, 41(16), 5888–5894. <https://doi.org/10.1021/es070359o>
- 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). *Products and Process Design Principles: Synthesis, Analysis and Evaluation* (3rd ed.). John Wiley & Sons, Inc.
- Simpson, K., Ripley, B., Christin, P., Belcher, C., Lehmann, C., Thomas, G., & Osborne, C. (2016). Determinants of flammability in savanna grass species. *Journal of Ecology*, 104(1), 138–148. <https://doi.org/10.1111/1365-2745.12503>
- Skogestad, S., & Morari, M. (1988). Understanding the dynamic behavior of distillation columns. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 27(10), 1848–1862. <https://doi.org/https://doi.org/10.1021/ie00082a018>
- Sullivan, C. J., Kuenz, A., & Vorlop, K.-D. (2018). Propanediols. *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*, 1–15. [https://doi.org/10.1002/14356007.A22\\_163.PUB2](https://doi.org/10.1002/14356007.A22_163.PUB2)
- Sun, S., Lü, L., Yang, A., Wei, S., & Shen, W. (2018). Extractive distillation: Advances in conceptual design, solvent selection, and separation strategies. *CjChE*, 27(6), 1247–1256. <https://doi.org/10.1016/j.cjche.2018.08.018>
- Treybal, R. E. (1988). *Operaciones de Transferencia de Masa* (2nd ed.). McGrawHill.
- Wasylikiewicz, S., Kobyłka, L., & Castillo, F. (2000). Optimal design of complex azeotropic distillation columns. *Chemical Engineering Journal*, 79(3), 219–227. [https://doi.org/10.1016/S1385-8947\(00\)00161-3](https://doi.org/10.1016/S1385-8947(00)00161-3)
- Wurzel, K. A. (2005). Glycerol. *Encyclopedia of Toxicology*, 449–451. <https://doi.org/10.1016/B0-12-369400-0/00457-9>

Zhang, L., Fung, K. Y., Wibowo, C., & Gani, R. (2018). Advances in chemical product design. *Reviews in Chemical Engineering*, 34(3), 319–340. <https://doi.org/10.1515/revce-2016-0067>



## Anexos