

ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL

**FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA Y
AGROINDUSTRIA**

**MODELADO Y SIMULACIÓN DE PROCESOS INVOLUCRADOS EN
LA PRODUCCIÓN DE BIOETANOL A PARTIR DE SUERO DE
LECHE**

**MODELADO DE LA DESTILACIÓN EXTRACTIVA PARA LA
OBTENCIÓN DE ETANOL ANHIDRO GRADO CARBURANTE A
PARTIR DEL FERMENTADO DE SUERO DE LECHE**

**TRABAJO DE INTEGRACIÓN CURRICULAR PRESENTADO COMO
REQUISITO PARA LA OBTENCIÓN DEL TÍTULO DE INGENIERA EN QUÍMICA**

KELLY VANESSA MONTERO MERA

kelly.montero@epn.edu.ec

DIRECTOR: MARÍA AUGUSTA PÁEZ LARA

maria.paez@epn.edu.ec

DMQ, febrero 2022

CERTIFICACIONES

Yo, KELLY VANESSA MONTERO MERA declaro que el trabajo de integración curricular aquí descrito es de mi autoría; que no ha sido previamente presentado para ningún grado o calificación profesional; y, que he consultado las referencias bibliográficas que se incluyen en este documento.

KELLY MONTERO

Certifico que el presente trabajo de integración curricular fue desarrollado por KELLY VANESSA MONTERO MERA, bajo mi supervisión.

MARÍA AUGUSTA PÁEZ LARA
DIRECTOR

DECLARACIÓN DE AUTORÍA

A través de la presente declaración, afirmamos que el trabajo de integración curricular aquí descrito, así como el (los) producto(s) resultante(s) del mismo, son públicos y estarán a disposición de la comunidad a través del repositorio institucional de la Escuela Politécnica Nacional; sin embargo, la titularidad de los derechos patrimoniales nos corresponde a los autores que hemos contribuido en el desarrollo del presente trabajo; observando para el efecto las disposiciones establecidas por el órgano competente en propiedad intelectual, la normativa interna y demás normas.

KELLY VANESSA MONTERO MERA

MARÍA AUGUSTA PÁEZ

DEDICATORIA

A la niña que soñó con este momento, porque los sueños se cumplen, un consejo nunca dejes de soñar, a la persona que soy ahora, porque las noches en vela valieron totalmente la pena, recuerda que las caídas solo sirven para tomar impulso y a la mujer en la quien espero convertirme en el futuro porque el mundo espera ser conquistado y este es solo el inicio.

AGRADECIMIENTO

A mi mami que estuvo a mi lado siempre, aunque no me daba cuenta, a mi papi que me enseñó a ser decidida y luchar por lo que quiero, gracias a los dos por siempre acompañarme y tenerme paciencia, a mi ñaño que me enseñó lo valioso de tener un amigo, a mi tía que ha sido como mi segunda madre y ha estado en cada paso, y a mi abuelita que sin sus oraciones no habría llegado hasta aquí. También quiero agradecer mis amigos que pasaron de ser extraños a convertirse en mi segunda familia y han sido mi apoyo en estos 6 años, sin ustedes, nada habría sido igual.

Un agradecimiento especial al Inge Francisco que hasta el final me apoyó en todo lo que necesitaba sin importar ni el día ni la hora, a la Ingeniera María Augusta por su acompañamiento y guía en este proyecto y a cada profesor que ha sido partícipe de mi formación académica por transmitirme sus conocimientos y experiencias.

Infinitas gracias.

ÍNDICE DE CONTENIDO

CERTIFICACIONES	I
DECLARACIÓN DE AUTORÍA	II
DEDICATORIA.....	III
AGRADECIMIENTO	IV
ÍNDICE DE CONTENIDO	V
RESUMEN	VII
ABSTRACT	VIII
1 DESCRIPCIÓN DEL COMPONENTE DESARROLLADO	1
1.1 Objetivo general.....	2
1.2 Objetivos específicos.....	2
1.3 Alcance	2
1.4 Marco teórico	3
Etanol obtenido a partir de suero de leche	3
Azeótropo etanol-agua.....	3
Configuración de la columna de destilación	4
Modelos termodinámicos	6
Modelo de Wilson	6
Modelo UNIQUAC	6
Modelo NRTL (Non-Random Two Liquids).....	6
2 METODOLOGÍA.....	7
2.1 Configuración de la columna de destilación.....	7
2.2 Desarrollo del modelo.....	8
Masa molar retenida en cada plato	11
Descripción del equilibrio líquido-vapor	13
3 RESULTADOS, CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	16
3.1 Resultados	16
Configuración del sistema de destilación extractiva	16
Selección del Solvente.....	17
Columna de destilación extractiva.....	17
Modelo Matemático.....	18
Consistencia Matemática	22
Análisis de los perfiles dinámicos obtenidos	22

Análisis del consumo energético.....	25
3.2 Conclusiones	27
3.3 Recomendaciones.....	27
4 REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	29
5 ANEXOS.....	32
ANEXO I.....	33
ANEXO II.....	36
ANEXO III.....	38
ANEXO IV	41
ANEXO V	43
ANEXO VI	52

RESUMEN

El uso de etanol de grado carburante, que se obtiene a partir de una destilación extractiva para vencer el azeótropo etanol-agua, se propone como una alternativa a los combustibles derivados del petróleo ya que se disminuye el impacto ambiental.

El presente trabajo tiene como objetivo modelar el comportamiento de la destilación extractiva para obtener etanol anhidro de grado carburante, a partir de destilado obtenido con el fermentado de lactosuero, para lo cual definió un sistema de destilación a modelar que opera en modo batch, con 11 platos y se consideró un condensador total, el plato de alimentación del azeótropo se encuentra en el plato número 7, se utiliza glicerol como solvente y se alimenta en el plato número 3. Para formular el modelo matemático se utilizaron ecuaciones de balance de masa, ecuaciones de equilibrio, suma de fracciones molares y balance de energía, y se empleó el modelo termodinámico NRTL para calcular los coeficientes de actividad de los compuestos y así describir el equilibrio entre las fases líquido y vapor. El modelo propuesto con cero grados de libertad se resolvió con el soporte del software MATLAB R2020b para determinar las curvas de equilibrio líquido-vapor del sistema etanol-agua-glicerol.

Se empleó el método numérico de Euler explícito para resolver las ecuaciones diferenciales y como resultado se evaluaron los perfiles dinámicos que describen la variación de la concentración y la temperatura para cada plato. Así, el producto destilado constituye etanol con una pureza del 99,6 % mol a las 150 horas, con un consumo energético en el condensador que asciende a 18,394 MJ.

PALABRAS CLAVE: etanol de alta pureza, destilación extractiva, azeótropo, modelo termodinámico NRTL, equilibrio líquido-vapor, coeficientes de actividad.

ABSTRACT

The use of fuel-grade ethanol is proposed as an alternative to petroleum-derived fuels, to reduce the environmental impact generated, anhydrous ethanol is obtained from an extractive distillation used to break the ethanol-water azeotrope. The objective of this work is to model the behavior of the extractive distillation to obtain fuel grade anhydrous ethanol from alcohol obtained from whey fermentation, for which a mathematical model was elaborated consisting of a distillation column operating in batch mode, with 11 plates and a total condenser is considered, the feeding plate of the azeotrope is in stage number 7, glycerol is used as solvent, and it is fed in stage number 3. To solve the model, mass balance equations, equilibrium equations, sum of mole fractions and energy balance were used, and the NRTL model was used to calculate the activity coefficients of the compounds and thus describe the thermodynamic equilibrium between the vapor-liquid phases. MATLAB R2020 software was used as support to determine the liquid-vapor equilibrium curves of the ethanol-water-glycerol system, the numerical method used to solve the differential equations was the explicit Euler, as a result the dynamic profiles describing the variation of concentration and temperature as a function of time were obtained for each plate, finally ethanol was obtained with a purity of 99,6 mole % at 150 hours, and an energy consumption in the condenser of 18,394 MJ.

KEYWORDS: high purity ethanol, extractive distillation, azeotrope, thermodynamic model NRTL, vapor-liquid equilibrium, activity coefficients.

1 DESCRIPCIÓN DEL COMPONENTE DESARROLLADO

El uso de suero de leche para la producción de etanol de grado carburante se plantea como una alternativa a los combustibles a base de petróleo. El etanol se obtiene a partir de una serie de procesos industriales que incluyen la microfiltración, ultrafiltración, hidrólisis enzimática con β -galactosidasa, fermentación de suero de leche, y la purificación del fermentado mediante una destilación simple donde se obtiene etanol al 88% mol, concentración máxima que se puede alcanzar a través de esta operación ya se forma un azeótropo entre el etanol y el agua. Sin embargo, para un etanol de grado carburante con alta pureza del 99,6% mol es necesario realizar una destilación extractiva con el fin de separar el azeótropo que se genera entre los dos compuestos (Fonseca, 2018; Lauzurique, et al., 2016).

El estudio de la purificación de etanol mediante destilación extractiva incorpora un solvente que altera la volatilidad de los componentes, permitiéndole al etanol separarse del agua mediante evaporación, el solvente se caracteriza por tener un elevado punto de ebullición y baja volatilidad de tal forma que se mantiene en la fase líquida, este debe ser alimentado por la parte superior de la columna y por gravedad desciende hasta el último plato (Lauzurique, et al., 2016). Yatim et al. (1993), analiza el modelado de una columna de destilación extractiva que opera por lotes, mediante balances de masa y energía, así como equilibrio termodinámico entre fases líquido-vapor. Lang et al. (1994), incorporó la variación del reflujo e influencia de la variación de la alimentación del solvente para un caso específico. Por otra parte, Chasoy (2012), analiza el comportamiento de etanol-agua-glicerina mediante ecuaciones las NRTL (Non-Random Two Liquids) que describen la interacción binaria entre los compuestos, a través de estas se calculan los coeficientes de actividad que son empleados para obtener las curvas de equilibrio líquido-vapor.

Este componente describe la separación de la mezcla etanol-agua, a través del modelado matemático de una columna de destilación extractiva, a partir de los cuales se obtienen los perfiles dinámicos para la concentración, temperatura y gasto energético, mediante la determinación previa de las condiciones de entrada, el tipo de solvente, la modalidad de operación y configuración de la columna de destilación. En este estudio no se contempla la recuperación del solvente.

1.1 Objetivo general

Modelar el comportamiento de la destilación extractiva para obtener etanol anhidro de grado carburante, a partir de alcohol obtenido por la fermentación de suero de leche

1.2 Objetivos específicos

1. Definir la configuración del sistema de destilación extractiva y tipo de solvente
2. Describir el equilibrio líquido-vapor de los compuestos mediante el modelo termodinámico apropiado
3. Determinar la variación de la concentración y temperatura a lo largo de la columna y en función del tiempo

1.3 Alcance

Se realizará un estudio teórico del proceso de destilación para la obtención de alcohol de grado carburante mediante el modelado matemático de una columna de destilación extractiva, sin contemplar la recuperación del solvente. Para ello, se determinarán las condiciones de entrada, tipo de solvente, modalidad de operación, interacción del solvente con el azeótropo mediante revisión bibliográfica, luego se plantearán los balances de masa y energía y los modelos termodinámicos que permitan describir de mejor manera este proceso de separación.

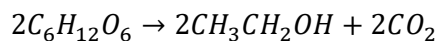
Mediante el software MATLAB R2020b se resolverá el modelo formulado para obtener las curvas que describan el equilibrio líquido-vapor, variación de concentración de los tres componentes y variación de la temperatura en función del espacio y tiempo, usando las ecuaciones NRTL para determinar los coeficientes de actividad de los compuestos. Finalmente, se evaluarán los resultados obtenidos y se compararán con valores bibliográficos sin incluir ninguna fase de validación experimental.

1.4 Marco teórico

Etanol obtenido a partir de suero de leche

El suero de leche es un subproducto resultante en la fabricación de quesos, se conoce que para producir 1 o 2 kg de queso se necesitan 10 litros de leche fresca, es decir que entre del 80 al 90% en volumen resultante es suero de leche, generalmente este suero es desechado en afluentes de río, alcantarillado público o en campos y pastizales, lo que lo convierte en uno de los contaminantes más grandes a nivel nacional, como una alternativa para mitigar el impacto ambiental que genera este subproducto se han realizado investigaciones donde se obtiene etanol anhidro a partir de suero de leche para emplearlo como aditivo en combustibles (Córdor, et al., 2017), este proceso comprende la microfiltración, ultrafiltración, hidrólisis enzimática con β -galactosidasa, fermentación de suero de leche, destilación simple, y destilación extractiva.

El etanol es un compuesto oxigenado que puede producirse mediante la fermentación alcohólica de los azúcares de la lactosa (glucosa y galactosa), mediante la relación estequiométrica descrita en la Ecuación 1.1, el etanol en esta etapa tiene una composición entre el 4% mol y 8% mol, posteriormente se realizan procesos de purificación donde se obtiene etanol azeotrópico al 88% mol. Por esta razón, para alcanzar una mayor concentración se incorporan procesos de separación energéticamente exhaustivos entre los que destacan destilación al vacío, destilación azeotrópica, destilación extractiva, pre- evaporación y adsorción con tamices moleculares (Lauzurique, et al., 2016).



Ecuación 1.1. Ecuación estequiométrica para la producción de etanol a partir de glucosa

En el Ecuador el etanol grado carburante con una pureza de 99,6% mol se utiliza para aumentar el octanaje de la gasolina y producir gasolina ECOPAIS. Se conocen dos tipos de esta, la gasolina E5 que contiene 5% de etanol en volumen, y la gasolina E10 que contiene 10% de etanol en volumen (Uyazán, et al., 2005; Lauzurique, et al., 2016).

Azeótropo etanol-agua

Una mezcla azeotrópica es la combinación de dos o más compuestos líquidos que tienen puntos de ebullición similares y composición constante, no pueden ser purificados por procesos de separación convencionales, la combinación etanol-agua es uno de los ejemplos más claros, el punto azeotrópico que presenta esta mezcla se localiza a 1 atm de presión, 78,2 °C de temperatura y una composición de 95,7% en peso (Ortega, et al., 2013).

Una de las alternativas con mayor aplicación para desplazar el azeótropo y obtener etanol de alta pureza es la destilación extractiva que involucra un tercer compuesto denominado solvente. Esta tecnología consiste en dos columnas de destilación que operan en serie, una de ellas se emplea para deshidratar el etanol a esta se alimenta solvente y posteriormente se recupera en una columna de recuperación. La destilación extractiva presenta como ventajas bajos costos energéticos, baja inversión y menor número de operarios requeridos (Lauzurique, et al., 2016).

Los solventes más utilizados para separar etanol y agua son glicoles, aminas, fenoles hidrodébiles, parafinas y tiofenos, estos se dividen en función de su capacidad de alterar el coeficiente de actividad de los componentes en fase líquida. Esta clasificación toma en cuenta la regla de Trouton que menciona que para líquidos inmiscibles la relación entre entalpía de vaporización y temperatura normal de ebullición corresponde a 88 J/ mol K (Chasoy, 2012). Las cinco categorías de los solventes son:

1. Glicoles, hidroxilaminas, hidroxilácidos, amidas y agua; todos con la capacidad de formar redes tridimensionales de enlaces de hidrógeno en fase líquida.
2. Etanol y ácido acético que son capaces de formar cadenas lineales a través de enlaces de hidrógeno.
3. Éteres, cetonas y compuestos aromáticos nucleofílicos que se comportan como receptores de enlaces de hidrógeno.
4. Cloroformo, dicloroetano, tricloroetano, que actúan como donadores de hidrógeno.
5. Compuestos aromáticos y el tetracloroetano, estos no actúan como receptores ni como donadores de enlaces hidrógeno (Chasoy, 2012).

El solvente debe tener un alto punto de ebullición que permita alterar la volatilidad relativa de los componentes y desplazar el punto azeotrópico, debe tener alta afinidad por uno de los componentes de la mezcla, de tal forma que permita extraerlo por la parte inferior de la columna (Pérez, 2016).

Configuración de la columna de destilación

El modo de operación de la columna de destilación puede ser continua, que consta de múltiples etapas en contracorriente donde la alimentación ingresa a la columna de manera continua en un plato intermedio, o discontinua que es una destilación por lotes, donde se obtienen productos químicos finos y de gran valor a partir de pequeñas cantidades de mezcla, este es un proceso transitorio con reflujo constante en el que una pequeña

modificación de las condiciones de operación tiene gran impacto económico. En comparación, la destilación continua es menos flexible ya que utiliza varias columnas de destilación y se necesita mucho tiempo para cambiar la mezcla que se está destilando, a diferencia de la destilación por lotes que es muy flexible y puede separar varios componentes diferentes utilizando una sola columna destilación (Zavala, 2004; Lombina y Otiniano, 1998).

La destilación Batch presenta una gran ventaja en comparación con la destilación continua debido a que es más flexible en procesos donde la composición química de la alimentación cambia frecuentemente, a nivel industrial se puede emplear como una separación multicomponente (Lombina y Otiniano, 1998).

McCabe y Thiele desarrollaron un método gráfico para la determinación del número de platos teóricos que se necesitan en una columna de destilación, ellos suponen que debe haber un derrame equimolar a través de la torre y dividen a la torre en dos secciones, la zona de agotamiento y zona de enriquecimiento, estos son separadas por el plato de alimentación, tal como se muestra en al Figura 1.1.

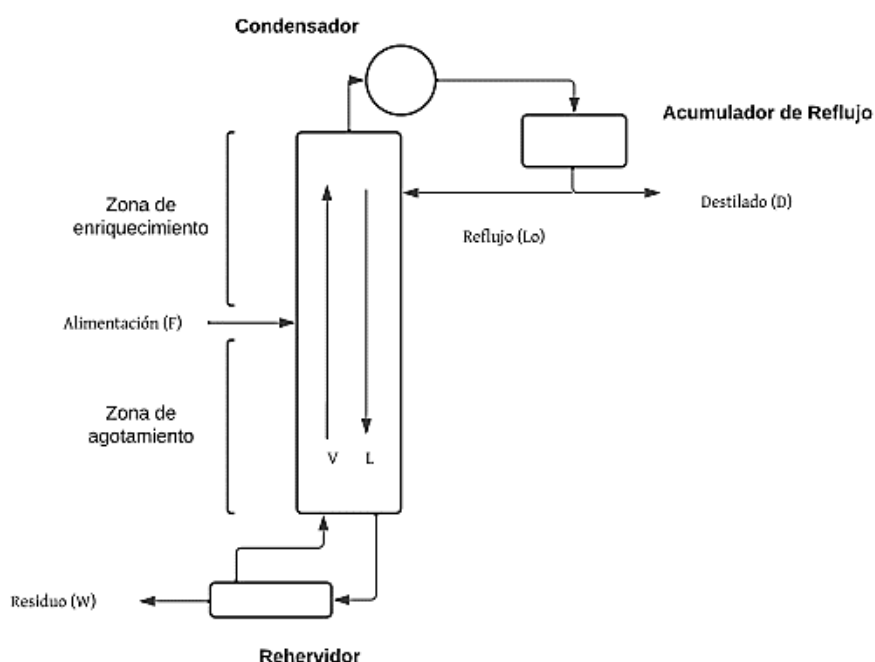


Figura 1.1. Partes de una columna de fraccionamiento

Todos los platos que se encuentran sobre el plato de alimentación al igual que este constituyen la zona de rectificación o zona de enriquecimiento, los platos que se encuentran por debajo de la alimentación forman parte de la zona de agotamiento. El flujo alimentado puede ser líquido frío, líquido saturado, parcialmente vaporizada, vapor saturado o vapor sobre calentado. Cuando la alimentación es líquida, este fluye por

gravedad hasta el rehervidor de la columna mientras que el vapor asciende hasta el condensador (McCabe, Smith, y Harriott, 2007, pp. 699-711; Zapata, et al., 2020).

Modelos termodinámicos

Son modelos que representan el equilibrio de fases líquido-vapor y permiten estimar el valor de los coeficientes de actividad y fugacidad, cada sistema de estudio cuenta con sus propios parámetros, los modelos para determinar los coeficientes de actividad más conocidos son Wilson, UNIQUAC y NRTL (Pérez, 2016).

Modelo de Wilson

Tiene en cuenta la energía de interacción intermolecular y las diferencias de tamaño y distribución espacial de las moléculas presentes en la mezcla, fue desarrollado en 1964 y se fundamenta con la definición de concepto de composición local y de la fracción de volumen local (Pérez, 2016).

Modelo UNIQUAC

Contempla la energía libre de Gibbs (ecuación 1.1) como dos partes aditivas, posee un término combinatorio g^C , que describe el tamaño molecular y diferencias de forma, y un término residual g^R que estima las interacciones moleculares, este modelo está descrito por la ecuación 1.2 (Farajnezhad et al., 2016).

$$g = \frac{G^E}{R * T}$$

Ecuación 1.1. Energía libre de Gibbs.

$$g = g^C + g^R$$

Ecuación 1.2. Ecuación UNIQUAC

Modelo NRTL (Non-Random Two Liquids)

Fue desarrollado en 1968 por Renon y Prausnitz y se aplica a sistemas parcialmente miscibles, se emplea para mezclas binarias no aleatorias, las moléculas se encuentran semi-agregadas, y se fundamenta en la teoría de Scott que considera la energía libre de Gibbs molar en exceso que está dada por la ecuación 1.3 (Loras y Lladosa, 2016).

$$\frac{g^E}{RT} = x_i x_j * \left[\frac{G_{ji} * \tau_{ji}}{x_i + x_j G_{ji}} + \frac{G_{ij} * \tau_{ij}}{x_j + x_i G_{ij}} \right]$$

Ecuación 1.3. Energía libre de Gibbs de exceso para el modelo NRTL

2 METODOLOGÍA

El modelado de la destilación extractiva para la obtención de etanol anhidro de grado carburante a partir de suero de leche constituye un trabajo de investigación con un enfoque mixto, del tipo cuantitativo y cualitativo, mismo que permitió analizar la concentración de etanol a lo largo de la columna de destilación y en función del tiempo. La recolección de datos se realizó a partir de análisis de artículos científicos y mediante el desarrollo de ecuaciones algebraicas y diferenciales que permitan describir el fenómeno de separación que ocurre dentro de la columna de destilación.

2.1 Configuración de la columna de destilación

La configuración de la destilación extractiva se definió a partir de una revisión bibliográfica, donde se establecieron las características de la corriente de alimentación y los requerimientos del producto final, modo de operación de la columna, número de platos, platos de alimentación, relación de flujo de solvente a flujo de alimentación (S/F), cantidad de reflujo, y el solvente adecuado que permita la separación del azeótropo etanol-agua.

La composición molar de la alimentación se estableció a partir de la composición alcanzada en la destilación simple del fermentado de lactosuero y se consideró que el rendimiento estequiométrico para transformar lactosa en etanol durante la fermentación es de 0,56 gramos de etanol por cada gramo de lactosa (Gantumur, et al., 2022; Zotta, et al, 2020).

La composición del producto que sale de la columna de destilación extractiva se estableció en base a los requisitos expuestos en la norma NTE INEN 2478:2009 para etanol anhidro de grado carburante que se presentan en la Tabla 2.1.

Tabla 2.1. Requisitos para etanol anhidro de grado carburante según la norma NTE INEN 2478:2009

Requisitos	Unidad	Mínimo	Máximo
Contenido de etanol	%	99,6	-
Acidez total (como ácido acético)	mg/100 mL	-	3,0
Conductividad eléctrica	$\mu\text{S/m}$	-	500
Densidad a 20°C	Kg/m^3	-	791,5
Contenido de cloruros	mg/L	-	32
Contenido de agua	%	-	0,3
Contenido de cobre	mg/Kg	-	0,1
Residuo por evaporación	mg/100 mL	-	5,0

La selección del solvente adecuado como agente extractivo se realizó mediante un análisis comparativo de los cinco grupos que comprenden su clasificación, además de una

evaluación de la eficiencia reportada en investigaciones experimentales de diferentes glicoles (Lauzurique, et al., 2016).

El número de platos de la columna de destilación y la relación de reflujo apropiada se establecieron a partir de los datos experimentales obtenidos por Chasoy (2012), en el cual se plantea un estudio comparativo de la curva de equilibrio líquido-vapor para el sistema binario etanol-agua y para el sistema ternario etanol-agua-glicerina a 101,325 kPa y con una relación de solvente a alimentación de 0,53 que se detallan en el Anexo I. A partir de estos datos, se aplicó el método gráfico de McCabe-Thiele para determinar el número de platos y el plato de alimentación previo calculo del reciclo mínimo a partir de la Ecuación 2.1. A continuación, se estimó el reciclo óptimo que representa 1,5 del reciclo mínimo, y se estableció la recta de alimentación (ROE) a partir de la Ecuación 2.2. Luego, se identificaron la concentración de etanol en la fase líquida de la alimentación (X_F), la concentración de la fase vapor en la alimentación (Y_F) y la concentración de etanol en la fase líquida a la salida de la columna de destilación (Y_F) para proceder a dibujar las etapas de separación requeridas y sus cálculos se encuentran en el Anexo I.

$$R_{min} = \frac{XD - YF}{YF - XF}$$

Ecuación 2.1. Relación de Reflujo mínimo

$$ROE = \frac{R_{min}}{1 + R_{min}}x + \frac{XD}{1 + R_{op}}$$

Ecuación 2.2. Recta de Operación en la zona de enriquecimiento.

El plato de alimentación del solvente se definió mediante los resultados obtenidos por Gil, García, y Rodríguez (2014) que analiza las curvas de equilibrio líquido-vapor experimentales a diferentes presiones y variación de la relación de flujo de solvente a flujo de alimentación para sistemas binarios etanol-agua y sistemas ternarios etanol-agua-solvente.

2.2 Desarrollo del modelo

El esquema del sistema de destilación extractiva que se analiza se muestra en la Figura 2.1. La descripción matemática del comportamiento de esta columna se realizó a través del sistema de ecuaciones MESH, que representa el equilibrio líquido-vapor por etapas en una columna de destilación de platos convencional en estado estable (Pérez, 2016). Este

modelo comprende el balance de materia (M), ecuaciones de equilibrio (E), sumatorio de fracciones molares o másicas (S) y balances de energía (H).

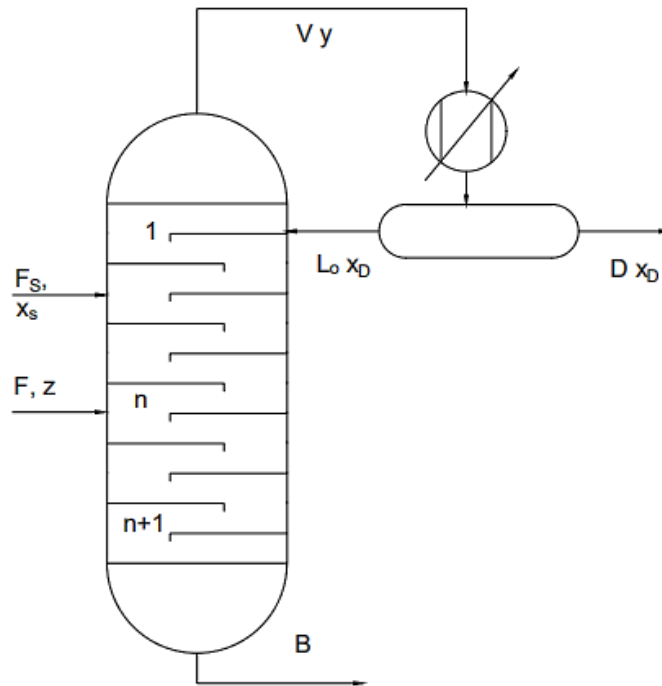


Figure 2.1. Esquema de la columna de destilación extractiva a modelar

Los flujos de destilado y residuo se determinaron mediante balances de masa general y por especies en el sistema global que incluye el condensador como se indica en las Ecuaciones 2.3 y 2.4 respectivamente.

$$F + F_s = D + B$$

Ecuación 2.3. Balance de masa global en la columna

$$F * x_{i,0} = D * x_{i,D}$$

Ecuación 2.4. Balance por especies en la columna

Donde:

F = flujo de alimentación

F_s = flujo de alimentación del solvente

D = flujo de destilado

X_D = fracción del componente i obtenida en el destilado

x_{i,0} = concentración del componente i al tiempo 0

El flujo de líquido (L) que desciende en cada plato se calculó a partir de la relación de reflujo (L/D), mientras que el flujo de vapor (V) que asciende en cada plato se estimó mediante un balance de masa general en el condensador. Ambos flujos se asumieron constantes en todos los platos de la columna de destilación y sus cálculos se encuentran en el Anexo II.

El primer grupo de las ecuaciones del modelo MESH se formularon mediante el planteamiento de balances de masa general y del compuesto más volátil, así como de balance de energía en cada plato y en estado transitorio. La acumulación de masa y energía se consideró en la masa molar retenida (M) en cada plato que depende del diseño y dimensiones del mismo. La Ecuación 2.5 describe el balance de materia total en estado transitorio para la columna de destilación.

$$\frac{dM}{dt} = L_{n-1} + V_{n+1} + F_n - L_n - V_n$$

Ecuación 2.5. Balance de materia total

Donde:

F = flujo molar de la alimentación del azeótropo

n = número de platos

La ecuación del balance de masa para cada compuesto en un plato n que es empleó se describe como:

$$\frac{dMx_{i,n}}{dt} = L_{n-1} * x_{i,n-1} + V_{n+1} * y_{i,n+1} - L_n * x_{i,n} - V_n * y_{i,n}$$

Ecuación 2.6. Balance de materia para el componente i en el plato n

Se contempló también las ecuaciones que describen la sumatoria de las fracciones de líquido y vapor, tal como se observa en las Ecuaciones 2.7 y 2.8 respectivamente

$$\sum_1^c x_{i,n} - 1 = 0$$

Ecuación 2.7. Sumatoria de fracciones molares para líquido.

$$\sum_1^c y_{i,n} - 1 = 0$$

Ecuación 2.8. Sumatoria de fracciones molares para el vapor.

Finalmente, la energía requerida del condensador se determinó a partir de la Ecuación 2.9, donde H corresponde a la entalpía de vaporización del condensado.

$$Q_C = -V * \hat{H}_{vap}$$

Ecuación 2.9 Balance de Energía en el condensador.

Masa molar retenida en cada plato

Para determinar la masa retenida en cada plato se calculó el diámetro de la columna mediante la Ecuación 2.10. (Ocon y Tojo, 1978).

$$\phi = \sqrt{\frac{4V * 22,4(273 + T) * 760}{\pi * \mu * 3600 * P * 273}}$$

Ecuación 2.10. Diámetro de la columna de destilación.

Donde:

T = temperatura en °C

P = presión de operación de la columna en mmHg

μ = velocidad del vapor en m/s

Por su parte, el cálculo de la velocidad de vapor se determinó a partir de la Ecuación 2.11.

$$\mu = K * \sqrt{\frac{\rho_L - \rho_V}{\rho_L}}$$

Ecuación 2.11. Velocidad de vapor en la columna de destilación

Donde:

ρ_L = densidad de líquido

ρ_V = densidad de vapor

K = coeficiente de diseño que es función de altura de cierre del líquido y de la distancia de los platos y se calculó en base a los datos tabulados en Tabla 2.2 (Ocon y Tojo, 1978).

Tabla 2.2. Valores de K en función de la distancia entre platos y altura del cierre de líquido en los platos

Distancia entre platos [cm]	Altura del cierre de líquido en los platos		
	12,5 [mm]	25 [mm]	50 [mm]
15	0,006-0,012	-	-
30	0,028-0,035	0,020-0,028	0,15-0,020
60	0,055	0,050	0,048
90	0,061	0,059	0,057

El diámetro de la columna permitió estimar el área circular transversal de la misma, y por consiguiente el área que ocupa cada plato al considerar como criterio de diseño que el 70% del área total de la columna está ocupada por los platos.

La altura sobre el vertedero se calculó a partir de la Ecuación 2.12 conocida como la ecuación de Francis, donde la longitud del tubo de descenso (L_w) se determinó con la Ecuación 2.13. (Perry, Green, y Maloney, 2008).

$$h_{ow} = 43,4 * \left(\frac{ql}{L_w} \right)^{2/3}$$

Ecuación 2.12. Ecuación de Francis

$$L_w = 1,62 * \frac{\emptyset}{2}$$

Ecuación 2.13. Longitud del tubo de descenso

La altura del vertedero se calculó a partir de la Ecuación 2.14, se consideró que β tiene un valor de 0,6 y h_w tiene un valor de 50 mm (McCabe, Smith, y Harriott, 2007).

$$hl = \beta' * (h_w + h_{ow})$$

Ecuación 2.14. Altura del vertedero

Luego, se estimó el volumen de cada plato como el correspondiente a un cilindro a partir de la altura del vertedero y el área de los platos. Finalmente, la masa retenida por los platos se calculó a partir de la Ecuación 2.15 que relaciona la densidad del fluido líquido con el volumen que ocupa cada plato.

$$M = \rho * V$$

Ecuación 2.15. Masa que se retiene un plato

El detalle de los calculos descritos en esta sección se presentan en el Anexo III.

Descripción del equilibrio líquido-vapor

El segundo grupo de ecuaciones del modelo MESH describe el equilibrio de fases en el que no existe tendencia al cambio de las propiedades de un sistema en el tiempo (Chasoy, 2012). Para ello, se implementó el modelo termodinámico NRTL que describe la no linealidad de la fase líquida y supone que la fase vapor es ideal de tal forma que representa acertivamente la interacción de etanol-agua y el solvente en una destilación extractiva.

El equilibrio de fases se calculó a partir de la Ecuación 2.16, que relaciona la composición molar líquida con la composición molar del vapor y un coeficiente de equilibrio que se calculó a partir de la Ecuación 2.17 que representa la Ley de Raoult modificada.

$$y_{i,n} - k_{i,n} * x_{i,n} = 0$$

Ecuación 2.16. Ecuación de equilibrio de fases

$$k_i = \frac{\gamma_i * P_i^{sat}}{P}$$

Ecuación 2.17. Ecuación de Raoult modificada

Donde:

k_i = constante de equilibrio de fases

P_i^{sat} = presión de saturación para cada compuesto

γ_i = coeficiente de actividad

Para el cálculo de la presión de saturación se empleó la ecuación de Antoine descrita en la Ecuación 2.18. A, B y C, son constantes que se establecieron al analizar el rango de temperaturas que puede alcanzar la mezcla (Felder y Rousseau, 2004).

$$\log(P^{sat}) = A - \frac{B}{C + T}$$

Ecuación 2.18. Ecuación de Antoine

Para el cálculo de los coeficientes de actividad se empleó la Ecuación 2.19, que relaciona los parámetros de energía de interacción con la composición molar de cada compuesto (Pérez, 2016).

$$\ln(\gamma_i) = \frac{\sum_{j=1}^m \tau_{ji} G_{ji} x_j}{\sum_{l=1}^m G_{li} x_l} + \sum_{j=1}^m \frac{x_j G_{ij}}{\sum_{l=1}^m G_{lj} x_l} \left[\tau_{ij} - \frac{\sum_{n=1}^m x_n \tau_{nj} G_{nj}}{\sum_{l=1}^m G_{lj} x_l} \right]$$

Ecuación 2.19. Coeficiente de actividad.

Donde:

τ = relación entre los parámetros de interacción binaria y la temperatura en (°C)

G = parámetro de energía de interacción

x = composición molar del líquido

m = número de compuestos de la mezcla a analizar

i, j = índices de la sumatoria para especificar el número de compuesto y su ubicación en la columna

Por su parte, el cálculo de τ se realizó a partir de expresión:

$$\tau_{ij} = a_{ij} + \frac{b_{ij}}{T}$$

Ecuación 2.20. Relación de los parámetros de interacción y la temperatura

Donde:

a,b = parámetros de interacción binaria

Para determinar la energía de interacción se empleó la Ecuación 2.21, donde α es el parámetro de ajuste NRTL y varía entre 0 y 1.

$$G_{ji} = \exp(-\alpha_{ji} \tau_{ji})$$

Ecuación 2.21. Parámetro de energía de interacción

Los parámetros de interacción binaria y parámetro de ajuste para el modelo NRTL se determinaron en base al estudio realizado por Pérez (2016).

Para determinar si el sistema planteado tiene solución se determinaron los grados de libertad cuyo detalle de cálculos se encuentra en el Anexo IV. Para ello, se contabilizaron las variables conocidas, variables desconocidas y número de ecuaciones planteadas.

La resolución del modelo formulado se realizó mediante el software MATLAB R2020b. Se programaron en dos scripts, uno principal que incorpora los balances de masa, ecuaciones de equilibrio, sumatorias de fracciones molares en líquido y vapor y balances de energía de la columna de destilación, donde se empleó Euler Explícito como método numérico para la solución de las ecuaciones diferenciales, fue necesario discretizar las ecuaciones de balance de masa tal como se muestra en la Ecuación 2.22.

$$x_{i,j+1} = x_{i,j} + \frac{L_{n-1} * x_{i,n-1} + V_{n+1} * y_{i,n+1} - L_n * x_{i,n} - V_n * y_{i,n}}{M} * \Delta t$$

Ecuación 2.22. Discretización de la fracción molar líquida

El otro script complementario consta de una función anidada donde se incluyen las ecuaciones del modelo termodinámico NRTL para el cálculo de la composición en estado vapor.

3 RESULTADOS, CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

3.1 Resultados

Configuración del sistema de destilación extractiva

En la Tabla 3.1 se presenta la composición del producto que se obtiene luego de la destilación simple del fermentado de lactosuero.

Tabla 3.1. Composición del fermentado a partir de suero de leche

Compuesto	Composición [% peso]
Etanol	96,67
Agua	2,88
Volátiles	0,45

Se evidencia que la corriente de alimentación se trata de una mezcla binaria etanol-agua, ya que la fracción porcentual de otros compuestos volátiles es menor que 1 y se pueden despreciar. Gantumur, et al. (2022) menciona en su estudio que entre los compuestos volátiles se incluyen alcoholes superiores, aldehídos, ésteres y ácido acético; pero no se advierte la presencia de metanol dado que el suero de leche no contiene pectina.

Por otra parte, la concentración de etanol en la salida de la destilación simple correspondería a la concentración molar de etanol azeotrópico a 1 atm que es igual a 88% mol, misma que se corrobora en la curva de equilibrio para etanol-agua obtenida con el modelo termodinámico NRTL que se muestra en la Figura 3.1 y cuyos datos tabulados se presentan en el anexo AI en la Tabla AI.1 (Gil, García, y Rodríguez, 2014).

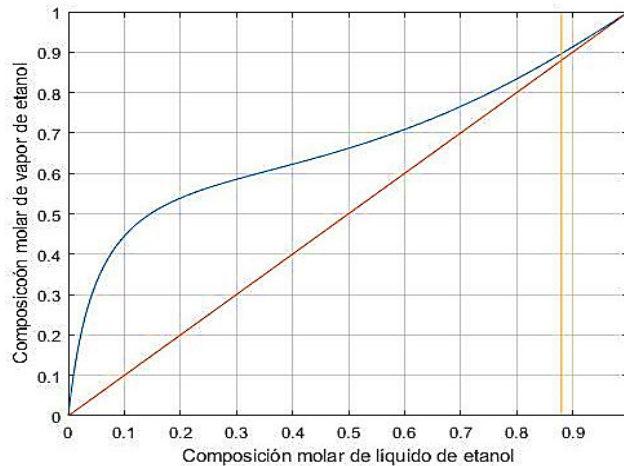


Figura 3.1. Curva de ELV para una mezcla etanol-agua con el modelo NRTL

En este contexto, la Norma NTE INEN 2478:2009 menciona que el etanol de alta pureza equivalente a grado anhidro carburante deberá alcanzar una concentración del 99,6% mol, lo que posiciona a la destilación extractiva como una alternativa de separación atractiva frente a una destilación simple que no se podría implementar (Gerbaud, et al., 2019). En la Tabla 3.2 se resume la composición en fracción molar de la alimentación y del producto de interés requerido para el presente estudio.

Tabla 3.2. Composiciones de entrada y salida de la columna de destilación extractiva.

Compuesto	Alimentación [% mol]	Destilado [% mol]
Etanol	0,88	0,996
Agua	0,12	0,004

Selección del Solvente

Lauzurique, et al. (2016), realiza una comparación entre etilenglicol, glicerol y propilenglicol donde se analiza la eficiencia del solvente y el número de etapas. Los resultados indican que la concentración en moles para el producto de destilación alcanzada fue de 0,9747 % con etilenglicol, 9957% con glicerol y 0,9957 % con propilenglicol. Particularmente, utilizar glicerol como solvente disminuye el consumo energético al igual que el número de platos requeridos para la separación y por consiguiente incrementa la eficiencia. En este sentido, el glicerol cumpliría con los requisitos necesarios para la separación de etanol de agua, pues se evidencia un incremento de la volatilidad relativa del etanol, lo que permite una mejor separación (Ramírez y Valverde, 2010).

En relación con el análisis de los grupos de solvente, la glicerina se encuentra en el Grupo 1, es decir, que causa desviaciones positivas a la Ley de Raoult dado que forma redes mediante enlaces de hidrógeno. Además, se registra que la relación de Trouton alcanza un valor de 163,7 J/mol K, lo que indica que es uno de los mejores solventes que se puede emplear en la separación de la mezcla azeotrópica etanol-agua (Chasoy, 2012).

Columna de destilación extractiva

La columna de destilación extractiva operará en modalidad batch por la mayor flexibilidad frente a la destilación continua, de tal manera que la composición química de la alimentación cambia frecuentemente, a partir de esta se obtienen componentes de alta pureza y es posible también la variación continua de las condiciones de operación con el tiempo. Asimismo, se trata de un proceso transitorio con reflujo constante, donde se puede

analizar la variación de la concentración de etanol a lo largo de la columna y en función del tiempo (Lombina y Otiniano, 1998).

En la Figura 3.2 se muestra la aplicación del método gráfico de McCabe Thiele sobre la curva de equilibrio que permitió definir un reflujo mínimo de 1,9 y un reflujo óptimo de operación de 2,85 para una relación de flujo de solvente a flujo de alimentación de 0,53. Se evidencia la necesidad de operar con 11 platos, 7 platos en la zona de rectificación y 4 platos en la zona de agotamiento. La alimentación ingresará en el plato 7 mientras que el solvente lo hará en el plato número 3, ya que, de acuerdo con Gil, García, y Rodríguez (2014), si el solvente es alimentado en los platos 3 a 5 la concentración de etanol aumenta. En forma complementaria, el rango de separación entre los platos de alimentación deberá ser lo más grande posible para que el solvente interactúe con la mezcla en la mayor parte de la columna, en este caso se plantean 4 etapas de separación.

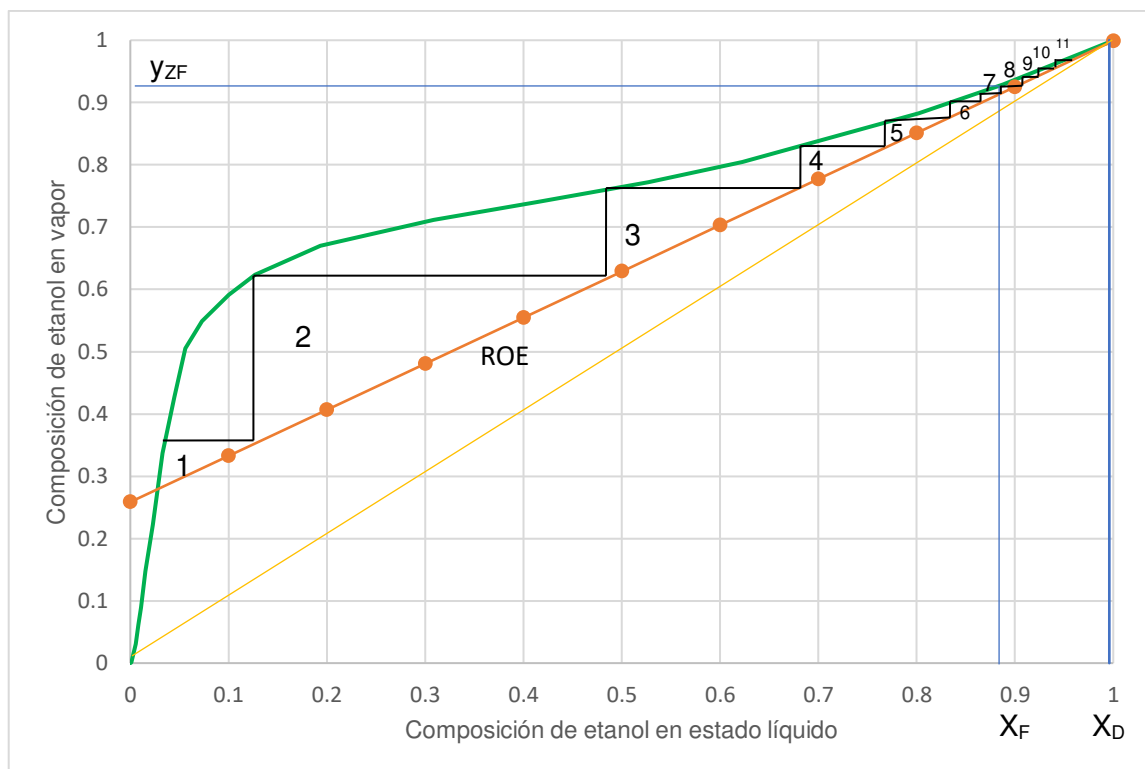


Figura 3.2. Curva de equilibrio y línea de operación para la determinación del número de platos para un S/F de 0,53

Modelo Matemático

El sistema de destilación extractiva a modelar está conformado por un tambor de condensación total y 11 platos teóricos que funcionan en cascada, es decir, que cada plato depende del anterior y posterior. La formulación del modelo supone que la presión de

operación de la columna es constante e igual a 1 atm, no existe intercambio de energía con el exterior, los platos son teóricos, el flujo del líquido y vapor son constantes a lo largo de la columna, el vapor se comporta como un gas ideal y la masa retenida en los platos permanece constante.

En la estructura matemática del modelo MESH, como primer grupo de ecuaciones, se presentan los balances de masa general y para el compuesto más volátil en el condensador, en el plato 1, y en los platos de alimentación del solvente y del azeótropo.

$$\frac{dx_{1,D}}{dt} = \frac{V * y_{1,1} - D * Dx_{1,1} - L * Dx_{1,1}}{M}$$

Ecuación 3.1. Balance de masa para el condensador

La Ecuación 2.2 describe el balance de masa para el plato 1 cuyas corrientes de líquido y vapor se esquematizan en la Figura 3.3.

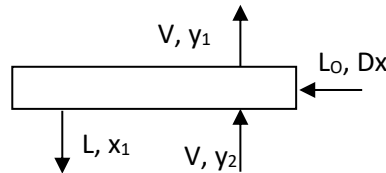


Figura 3.3. Esquema de corrientes en el plato 1

$$\frac{dx_{1,1}}{dt} = \frac{(L_0 * Dx_{1,0} + V * y_{1,2} - L * x_{1,1} - V * y_{1,1})}{M}$$

Ecuación 3.2. Balance de masa para el plato 1

La Figura 3.4 muestra las corrientes de entrada y salida de vapor y líquido para el plato de alimentación del solvente, cuyo balance de masa se describe en la Ecuación 3.3, donde F_s es la alimentación del solvente y X_{FS} es la concentración del solvente alimentado.

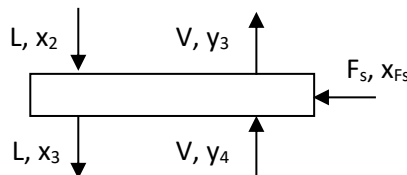


Figura 3.4. Esquema de corrientes en el plato 3

$$\frac{dx_{1,3}}{dt} = \frac{L * x_{1,2} + V * y_{1,4} + F_s * X_{FS} - L * x_{1,3} - V * y_{1,3}}{M}$$

Ecuación 3.3. Balance de masa para el plato 3

La Figura 3.5 indican las corrientes de entrada y salida de vapor y líquido para el plato de alimentación del azeótropo, cuyo balance de masa se describe en la ecuación 3.4 describe el balance de masa para este plato.

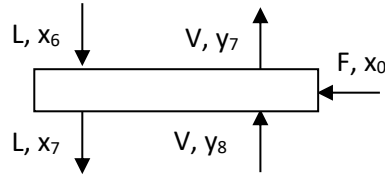


Figura 3.5. Esquema de corrientes en el plato 7

$$\frac{dx_{1,7}}{dt} = \frac{L * x_{1,6} + V * y_{1,8} + F * x_{1,0} - L * x_{1,7} - V * y_{1,7}}{M}$$

Ecuación 3.4. Balance de masa para el plato 7

En referencia a la descripción del ELV, como segundo grupo de ecuaciones, en la Tabla 3.3 se detallan los coeficientes de actividad para el sistema ternario agua-etanol-glicerol, mientras que en la Tabla 3.4 se muestran las constantes de Antoine (Pérez, 2016).

Tabla 3.3. Parámetros del modelo termodinámico NRTL para el sistema ternario agua-etanol-glicerol

Compuesto	a	B	α
Etanol-Agua	3,4578	-586,0809	0,3
Agua-Etanol	-0,8009	246,16	
Etanol-glicerina	0	442,713	
Glicerina-etanol	0	36,1390	
Agua-glicerina	-1,2515	272,6075	
Glicerina-agua	-0,7318	170,9167	

Tabla 3.4. Constantes de Antoine

Compuesto	A	B	C
Etanol	8,1122	1592,864	226,184
Agua	7,96681	1668,21	228
Glicerina	6,16501	1036,056	28,097

En síntesis, el enfoque sistemático para la resolución del modelo, que se muestra en la Figura 3.6, consiste en partir del balance de masa por componentes para calcular la composición molar líquida de etanol, agua y glicerina, a continuación, se formula un sistema de ecuaciones con las ecuaciones contempladas en el modelo NRTL y se calculan los coeficientes de actividad y mediante la Ley de Raoult modificada se determinan la composición molar del vapor y temperatura en cada plato y para cada instante de tiempo.

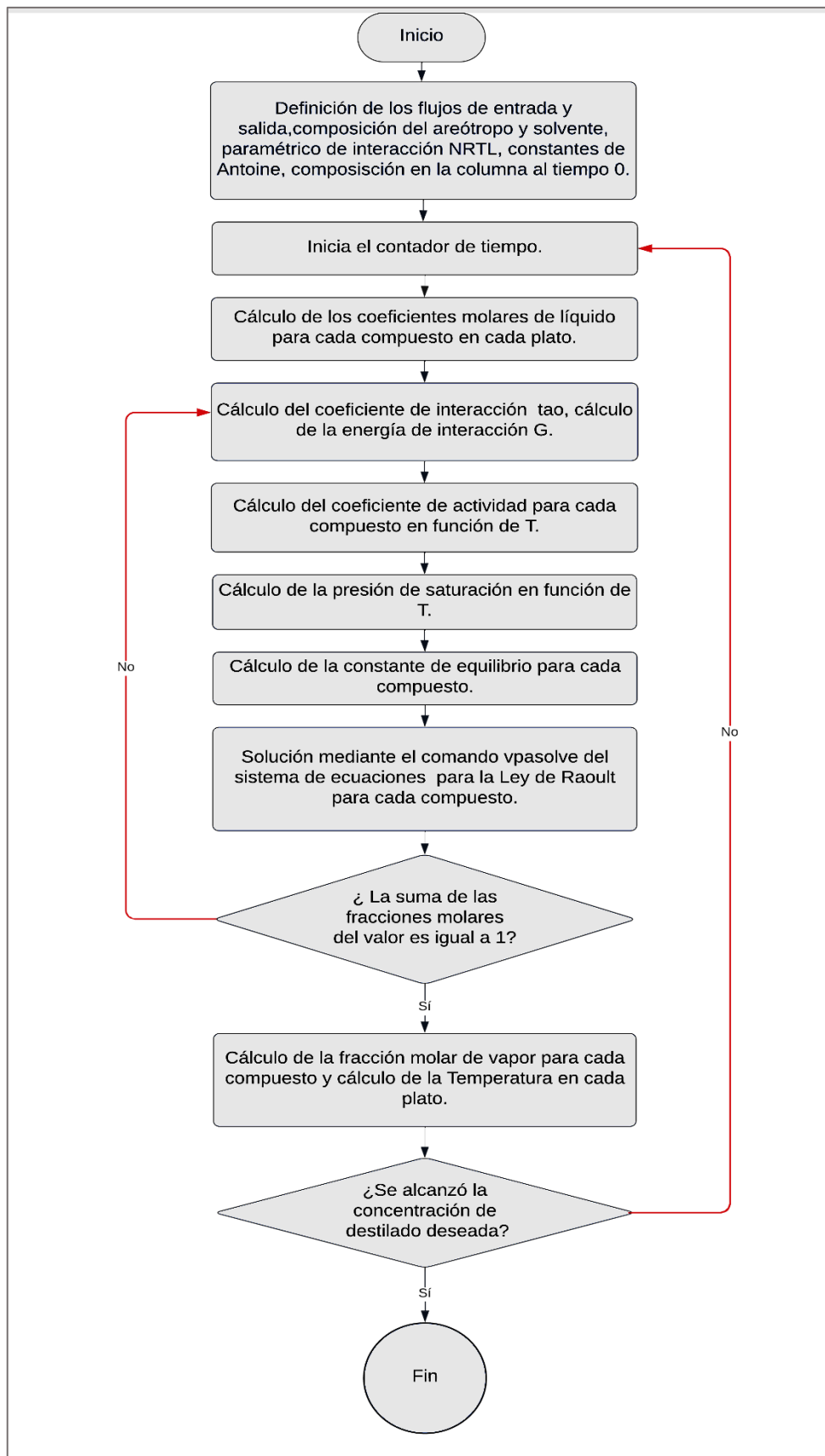


Figura 3.6. Diagrama de flujo del procedimiento de resolución del modelo formulado

Consistencia Matemática

En la Tabla 3.5 se presentan las condiciones de operación de la columna de destilación extractiva para una base de cálculo de 100 kmol/h de flujo de alimentación del azeótropo. La relación de reflujo se definió de acuerdo con lo expuesto por Chasoy (2012), que establece que a mayor relación de reflujo mayor eficiencia en la separación del azeótropo, en este caso se consideró S/F de 0,53.

Tabla 3.5. Condiciones de operación de la columna de destilación extractiva.

Parámetro	Símbolo	Valor	Unidades
Flujo de azeótropo	F	100	kmol/h
Flujo del solvente	FS	53	kmol/h
Destilado	D	88,35	kmol/h
Relación de reflujo	RR	1,35	-
Flujo de líquido	L	119,28	kmol/h
Flujo de Vapor	V	207,63	kmol/h
Masa retenida en cada plato	M	416,11	kmol/h

Al emplear una relación de reflujo de 1,35 se obtiene 88,35 kmol/h de producto destilado que en relación con la alimentación implica un rendimiento de 99,99%, esto se atribuye a que el condensador actúa como un plato teórico más lo que permite incrementar recuperación de etanol. De acuerdo con Chasoy (2012) al emplear la misma relación de flujo de solvente a alimento se logra 86,8 kmol/h de producto destilado con una concentración de etanol de 99,5 % mol; por lo tanto, es posible inferir que el porcentaje de recuperación alcanzado es satisfactorio.

Luego de la evaluación de la consistencia matemática y la determinación de los grados de libertad del modelo matemático formulado, se identificaron 19 variables conocidas también denominadas variables de entrada, 33 variables independientes desconocidas y 14 ecuaciones combinadas entre algebraicas y diferenciales ordinarias, que producen cero grados de libertad de manera que con certeza el modelo tiene solución única.

En el Anexo V se incluyen los códigos de programación elaborados en MATLAB R2020b para la solución de este modelo. La resolución en el programa tiene un tiempo de compilación de 1 hora y 11 minutos.

Análisis de los perfiles dinámicos obtenidos

La variación de la fracción molar en función del tiempo para cada plato en la zona de rectificación y en la zona de agotamiento se muestra en las Figura 3.7 y 3.8

respectivamente. Se resalta de color celeste la fracción molar de etanol obtenida en el condensador, a las 150 horas pues constituye el producto de interés.

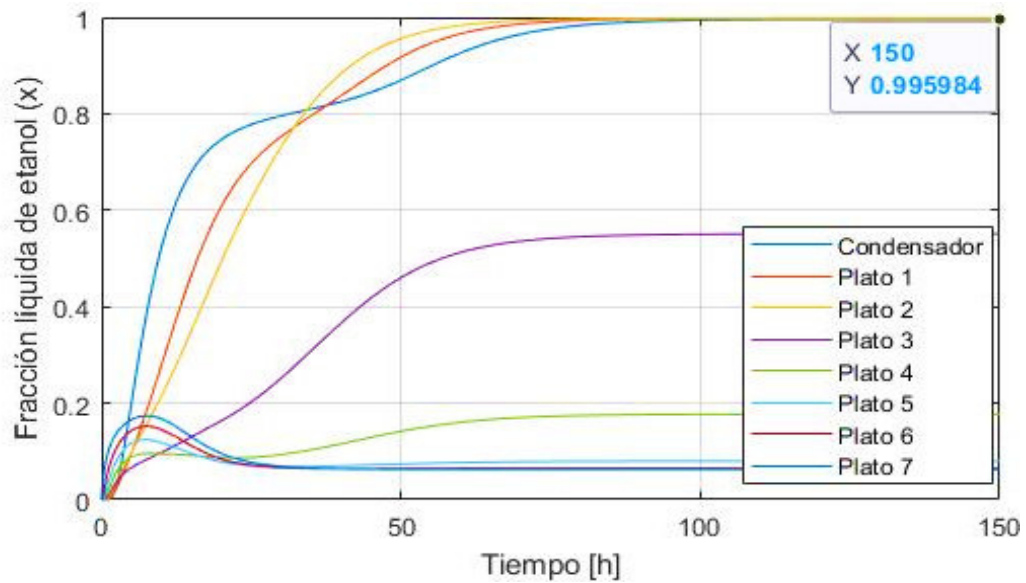


Figura 3.7. Perfil dinámico para la fracción líquida de etanol en la zona de enriquecimiento

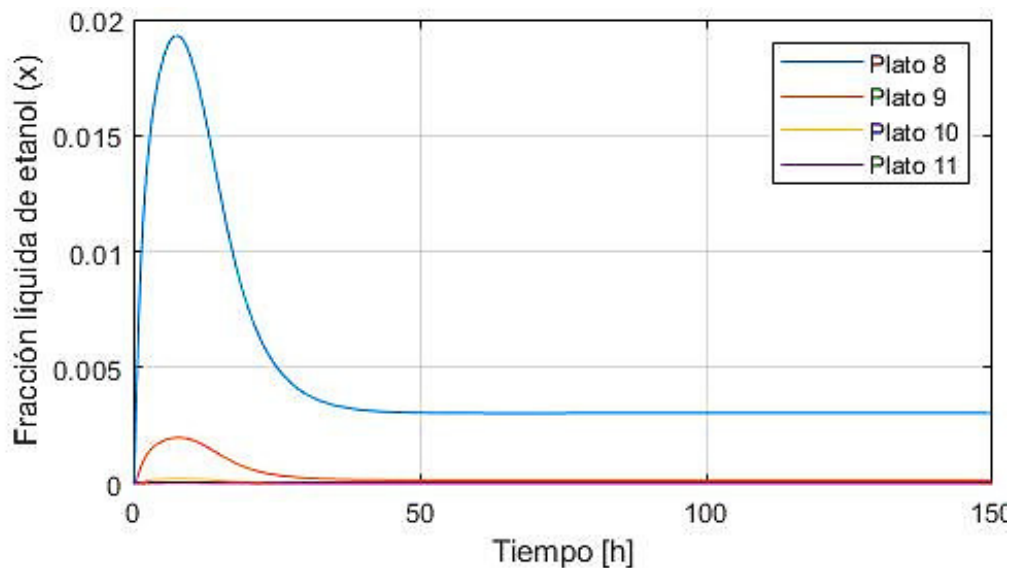


Figura 3.8. Perfil dinámico para la fracción líquida de etanol en la zona de agotamiento

La destilación extractiva con glicerol como solvente permite obtener un producto con una pureza de etanol del 99,58 % que cumple con los requisitos de la norma NTE INEN 2478:2009 y por tanto se puede catalogar como un etanol anhidro de grado carburante. En los platos del 1 al 7 que conforman la zona de rectificación se evidencia un perfil dinámico de etanol con tendencia ascendente conforme los platos se encuentran más cerca del condensador.

La interacción de solvente con la mezcla azeotrópica en el plato 3 inicia a las 6 horas, cuando se registra una fracción molar de $1,158 \times 10^{-4}$ para etanol, 0,940 para agua y 0,060 para glicerol, lo mismo ocurre en el plato 7, que es el plato de alimentación del azeótropo, donde se registra una fracción molar de 0,066 de etanol, 0,934 de agua y $8,599 \times 10^{-9}$ para glicerol. En este momento, el vapor que asciende se encuentra enriquecido y eleva su concentración en etanol conforme alcanza la parte superior de la columna de destilación.

Al contrario, en la zona de agotamiento es evidente la ausencia de etanol y la presencia de todo el solvente alimentado desde el plato 3. De hecho, la composición del plato en los fondos de la columna es igual a 0,556 de agua y 0,444 de glicerol, lo que coincide con los resultados alcanzados por Wheeler, Araujo, y Hernández (2013), donde se explica que etanol purificado sale por la parte superior de la columna y el solvente sale íntegro por el último plato. Este comportamiento se debe a que en la destilación extractiva la selección adecuada del solvente asegura que el mismo no se evapore durante el proceso de separación de manera que se altere la volatilidad relativa del compuesto de interés y se logre vencer el azeótropo.

En la Tabla 3.6 se registran los valores de las fracciones molares obtenidas para etanol, agua y glicerol en cada plato a las 150 horas. Se observa que la composición de etanol aumenta conforme se alcanza el plato superior, y lo contrario ocurre con el solvente. Respecto a las fracciones molares del vapor, se evidencia que en todos los casos la glicerina tiende a 0 dado que su punto de ebullición normal es superior al del etanol y el agua. Estos resultados sugieren que, con el número de platos teóricos evaluados y con el solvente seleccionado, la eficiencia de desplazamiento del azeótropo es alta.

Tabla 3.6. Fracción molar de cada compuesto para cada plato después de 150 horas

Número de Plato	Fracción molar líquida			Fracción molar del vapor		
	Etanol	Agua	Glicerina	Etanol	Agua	Glicerina
Condensador	0,9960	0,0040	0,0000	0,9908	0,0092	0,0000
1	0,9983	0,0017	0,0000	0,9960	0,0040	0,0000
2	0,9988	0,0012	0,0000	0,9973	0,0027	0,0000
3	0,5510	0,0046	0,4443	0,9976	0,0024	0,0000
4	0,1774	0,3783	0,4444	0,7404	0,2596	0,0000
5	0,0799	0,4758	0,4444	0,5257	0,4743	0,0000
6	0,0652	0,4905	0,4444	0,4697	0,5303	0,0000
7	0,0631	0,4924	0,4445	0,4613	0,5387	0,0000
8	0,0030	0,5525	0,4445	0,0363	0,9636	0,0001
9	0,0001	0,5554	0,4445	0,0017	0,9982	0,0001
10	0,0000	0,5555	0,4445	0,0001	0,9998	0,0001
11	0,0000	0,5557	0,4443	0,0000	0,9999	0,0001

Análisis del consumo energético

Los perfiles dinámicos de temperatura en cada plato se muestran en la Figura 3.9 y 3.10 para los platos que se encuentran sobre la alimentación del solvente y por debajo esta respectivamente.

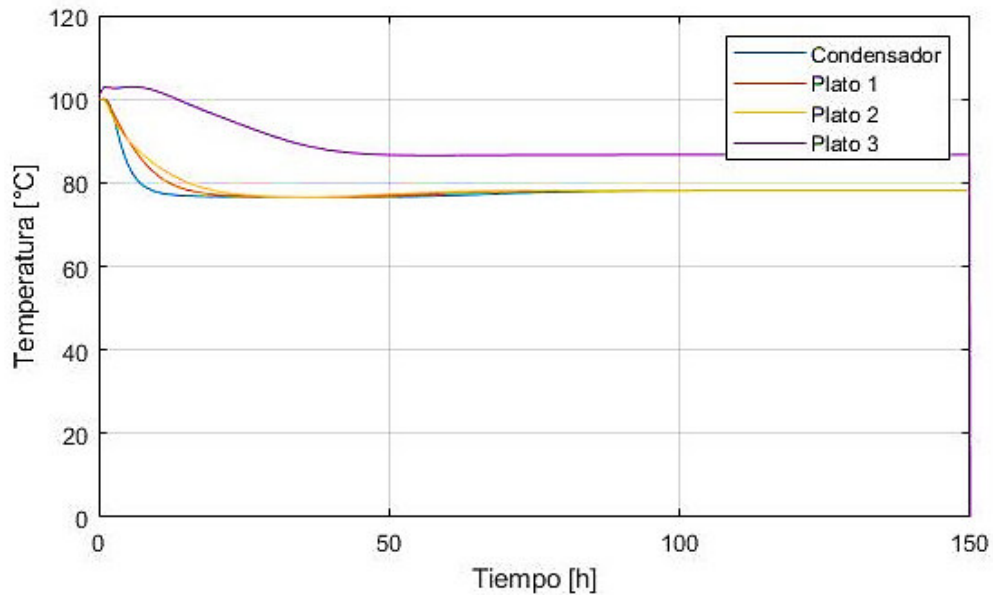


Figura 3.9. Perfil dinámico de la temperatura en los platos que se encuentran sobre la alimentación del solvente

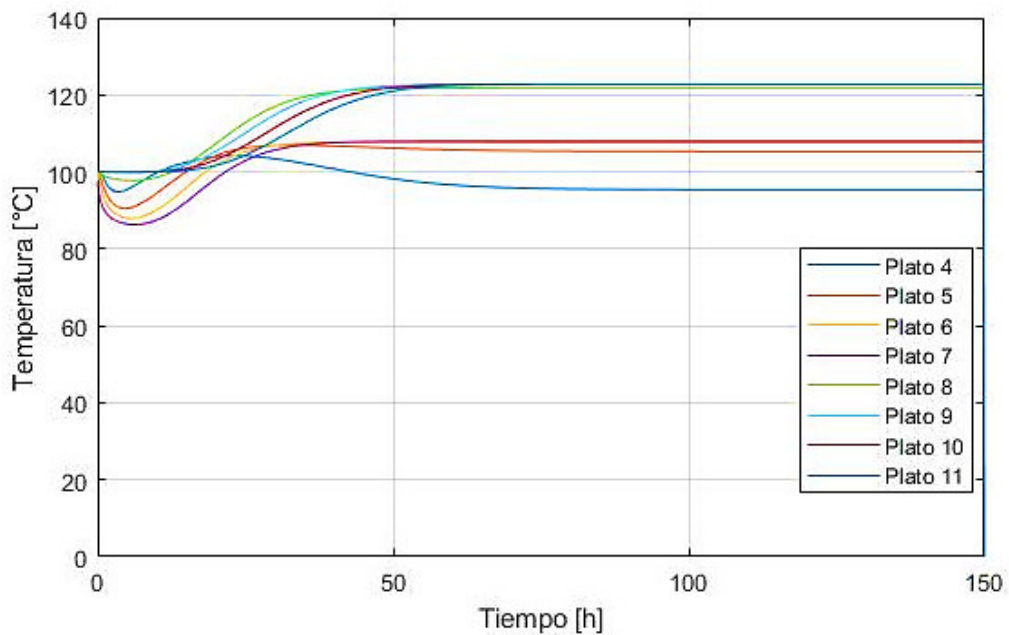


Figura 3.10. Perfil dinámico de la temperatura en los platos que se encuentran por debajo de la alimentación del solvente

Los platos que se encuentran sobre la alimentación del solvente exhiben una tendencia decreciente de la temperatura conforme aumenta la concentración de etanol que coincide con McCabe, Smith, y Harriott (2007) quienes mencionan que la temperatura disminuye conforme aumenta la concentración de etanol, mientras que en los platos que se encuentran bajo la alimentación del solvente sucede lo contrario debido a que se tiene mayor cantidad de vapor de agua cuyo punto de ebullición normal es mayor.

Un aspecto relevante en la operación de la destilación extractiva es la temperatura de ingreso del glicerol, ya que estudios previos indican que temperaturas de entrada inferiores a los 90°C favorecen la operación para relaciones de reflujo superiores a 0,35 (Chasoy, 2012). Se determinó que mientras más cercana sea la temperatura a los 70°C la composición de destilado es más alta; así la variación de la temperatura en el plato 3 inicia en 100°C y al transcurrir el tiempo se estabiliza hasta lograr un valor de 78,3°C que coincide con lo expuesto por (Uyazán, et al., 2006) que indica que esta es la temperatura a la que se forma el azeótropo.

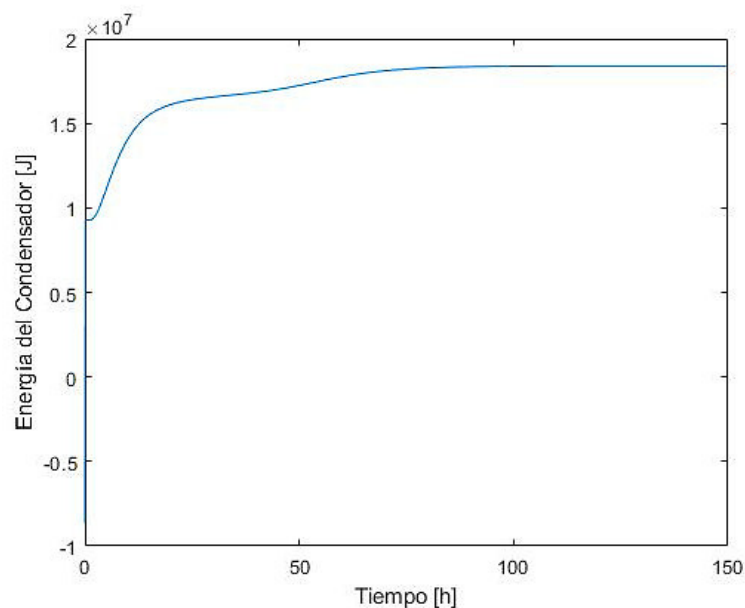


Figura 3.11. Energía del condensador en función del tiempo

Con respecto al consumo energético, se observa una influencia directa de la relación de reflujo, pero no en la concentración de etanol obtenida, por lo que se sugiere establecer relaciones de reflujo bajas (Uyazán, et al., 2006). Sin embargo, en este caso el flujo de alimentación del azeótropo y del solvente son altos por lo que se requiere operar con una relación de reflujo tan alta como 1,35 para una purificación eficiente de etanol. En la Figura 3.11 se observa que se requiere retirar 18,394 MJ en forma de calor en el tambor de

condensación, lo que constituye un consumo energético elevado que se atribuye a los flujos de alimentación y relación de reflujo.

3.2 Conclusiones

La columna de destilación que se empleó para separar etano-agua al 88% mol, utilizó glicerol como solvente, operó en modalidad Batch y su configuración consta 11 platos y un condensador total. La alimentación del solvente se realizó por el plato número 3, y la alimentación del azeótropo es a través del plato número 7.

El modelo termodinámico empleado para describir el equilibrio líquido-vapor de la mezcla etanol-agua fue el modelo NRTL que describe la interacción molecular entre dos compuestos para obtener así los coeficientes de actividad, a partir de los cuales se calcularon las fracciones molares para el vapor, para el cálculo de las fracciones molares líquidas se empleó un sistema de ecuaciones MESH que consiste en un balance de masa, ecuaciones de equilibrio, sumatorias de fracciones molares para el líquido y vapor y la ecuación de balance de energía.

La solución del modelo matemático se realizó a través del software MATLAB R2020b, donde se empleó Euler Explícito como método numérico para la solución de las ecuaciones diferenciales, el programa compiló en 1 hora con 11 minutos y se consideró un intervalo de tiempo discreto de 0,1 horas.

Para un flujo de alimentación de 100 kmol/h y relación S/F de 0,53 se determinó que la concentración alcanzada es de 99,6% mol a las 150 horas después de haber empezado el proceso, los perfiles de temperatura indicaron una variación entre 70 y 130 °C, lo que indicó que el solvente se mantuvo en estado líquido y alteró la volatilidad del etanol. Se registró un consumo energético de 18,394 MJ en el condensador.

3.3 Recomendaciones

Realizar un análisis dimensional al momento de realizar el código en MATLAB R2020 para que este compile correctamente.

Establecer un intervalo de tiempo discreto para Euler Explícito menor a 1 para evitar truncamiento numérico.

Emplear un software diferente que permita la compilación del programa en menor tiempo.

Realizar un análisis comparativo con diseños de columnas de destilación que empleen diferentes modelos termodinámicos, para evaluar la eficiencia de estos.

Diseñar diferentes columnas de destilación empleando diferentes solventes, para evaluar el número de etapas requeridas y la ubicación de la alimentación.

4 REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Chasoy, W. (2012). Determinación experimental del equilibrio líquido-vapor del sistema etanol-agua-glicerina. (Proyecto de titulación previo a la obtención del título de Ingeniero Químico). Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.
- [2] Córdor, P., Oviedo, D., Guerrero, J., Pérez, J., y Chanfrau, J. (2017). Valorización del lactosuero: Disminución del impacto ambiental de la Industria Láctea. *FICAYA Emprende*, 8(1), 2-5.
- [3] Farajnezhad, A., Asef, O., Asgarpour, M., y Shirazian, S. (2016). Correlation of interaction parameters in Wilson, NRTL and UNIQUAC model using theoretical methods. *Fluid Phase Equilibria*, 417, 181-186.
- [4] Felder, R., y Rousseau, R. (2004). *Principios elementales de los procesos químicos*. México: Limusa Wiley.
- [5] Fonseca, J. (2018). Estudio de la Mezcla Etilenglicol-Glicerol en destilación extractiva como agente de separación para la obtención de Etanol. (Proyecto de titulación previo a la obtención del título de Ingeniero Químico). Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.
- [6] Franco, J. (2016). Determinación experimental del equilibrio entre fases de sistemas azeotrópicos relacionados con Biocombustibles. Selección de Entrainers de Bajo Impacto Ambiental. (Proyecto de titulación previo a la obtención del título de Ingeniero Químico) Escuela Técnica Superior de Ingeniería, Valencia, España.
- [7] Gantumur, M.-A., Sukhbaatar, N., Qayum, A., Bilawal, A., Tsembeltsogt, B., Oh, K.-C. y Hou, J. (2022). Characterization of major volatile compounds in whey spirits produced by different distillation stages of fermented lactose-supplemented whey. *Journal of Dairy Science*, 105(1), 83-96.
- [8] Gerbaud, V., Rodríguez, I., Laszlo, H., Láng, P., Dénes, F., y You, X. (2019). Review of extractive distillation. Process design, operation optimization and control. *Chemical Engineering Research and Design*, Elsevier, 141, 229-271. doi:10.1016/j.cherd.2018.09.020f
- [9] Gil, I. D., García, L. C., y Rodríguez, G. (2014). Simulation of ethanol extractive distillation with mixed glycols as separating agent. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 31(1), 259-270.

- [10] Lang, P., Yatim, H., y Moszkowicz, P. y. (1994). Batch Extractive Distillation under constant reflux ratio. *Computers & chemical engineering*, 18(11/12), 1057-1069.
- [11] Lauzurique, Y., Zumalacárregui, L., Pérez, O., y Curbelo, A. (2016). Simulación de la destilación extractiva para la obtención de etanol anhidro empleando glicoles. *Ciencia, Docencia y Tecnología*, 27(53), 362-383.
- [12] Lombina, J., y Otiniano, M. (1998). Antecedentes y perspectivas de la operación de destilación discontinua. *Per Quim*, 1(1), 53-65.
- [13] Loras, S., y Lladosa, E. (2016). *Determinación Experimental del equilibrio entre fases de sistemas azeotrópicos relacionados con biocombustibles. Selección de Entrainers de Bajo Impacto Ambiental*. (Proyecto de titulación previo a la obtención del título de Ingeniero Químico). Universidad de Valencia, Valencia, España.
- [14] McCabe, W., Smith, J., y Harriott, P. (2007). *Operaciones unitarias en ingeniería química*. Ciudad de México: McGraw Hill.
- [15] Ocon, J., y Tojo, G. (1978). *Problemas de Ingeniería Química. Operaciones básicas*. Aguilar.
- [16] Ortega, C., Oseguera, J., Morales, M., y Márquez, C. (2013). *Simulación de la separación de una mezcla azeotrópica de etanol-agua, comparando métodos convencionales y no convencionales*. Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química, Mazatla, México.
- [17] Pérez, J. P. (2016). Análisis de controlabilidad de un sistema de destilación tipo Petlyuk para la separación de la mezcla Etanol-Agua utilizando glicerina como solvente. Universidad de los Andes, Quito, Ecuador.
- [18] Perry, R., Green, D., y Maloney, J. (2008). *Manual del Ingeniero Químico*. Madrid: McGraw-Hill.
- [19] Ramírez, M., y Valverde, A. (2010). *Diseño de planta para la producción de etanol carburante a partir de caña de azúcar*. Escuela Académico profesional de Ingeniería Química. (Proyecto de titulación previo a la obtención del título de Ingeniero Químico). Trujillo. Universidad Nacional de Trujillo, Trujillo, Perú.
- [20] Uyazán, A., Gíl, I., Aguilar, J., Rodríguez, G., y Caicedo, L. (2006). Producción de alcohol carburante por destilación extractiva: Simulación del proceso con glicerol. *Revista Ingeniería e Investigación*, 26(1), 45-50.

- [21] Wheeler, M., Araujo, P., y Hernandez, M. (2013). *Simulación de deshidratación de etanol usando derivados de la industria de biodiesel*. (Proyecto de titulación previo a la obtención del título de Ingeniero Químico). Univesidad Nacional de Tucumán.
- [22] Yatim, H., Moszkowicz, P., y Otterbein, M. y. (1993). Dynamic Simulation of Bach Extractive Distillation process. *Computers y chemical engineering*, 17(1), S57-S62.
- [23] Zapata, Z., Venegas, D., Rendón, J., y Velásquez, J. (2020). Caso de estudio de la destilación etanol-agua en operación continua y discontinua y su simulación con ecuaciones cúbicas de estado y modelos de actividad. *TecnoLógicas*, 23(49), 223-249. doi:<https://dx.doi.org/10.22430/issn.2256-5337>
- [24] Zavala, J. (2004). *Optimización del proceso de destilación discontinua*. . (Proyecto de titulación previo a la obtención del título de Ingeniero Químico). Instituto Tecnológico de Celaya, Guadalajara, México.
- [25] Zotta, T., Solieri, L., Lacumin, L., Picozzi, C., y Gullo, M. (2020). Valorization of cheese whey using microbial fermentations. *Appl Microbiol Biotechnol*, 104(7), 2749-2764. doi:10.1007/s00253-020-10408-2

5 ANEXOS

ANEXO I. Cálculo de la composición de entrada a la destilación extractiva.

ANEXO II. Curva de ELV para la mezcla etanol-agua.

ANEXO III. Cálculo los flujos de la columna de destilación en estado estacionario.

ANEXO IV. Consistencia matemática del número de ecuaciones, número de variables conocidas y desconocidas.

ANEXO V. Códigos de MATLAB.

ANEXO VI. Perfiles dinámicos para la fracción molar del vapor.

ANEXO I

Cálculo de la composición de entrada a la destilación extractiva a partir del estudio realizado por (Gantumur, et al., 2022).

Balance de Masa en la fermentación.

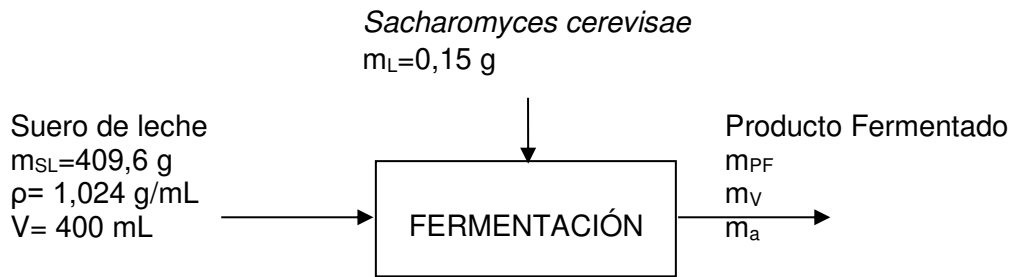


Figura Al.1. Corrientes de entrada y salida para la Fermentación.

Cálculo del producto fermentado (C)

$$m_{SL} + m_L = m_{PF}$$

$$m_{PF} = (409,6 - 0,15)g$$

$$m_{PF} = 409,75 g$$

Para el cálculo de los compuestos volátiles se tomaron en cuenta los valores presentes en la Tabla Al.1.

Tabla Al.1. Compuestos volátiles obtenidos en la destilación simple de bebidas fermentadas a partir de suero de leche.

Compuesto Fracciones de destilado	Cabeza [mg/L]	Corazón [mg/L]	Colas [mg/L]	Destilado Total [mg/L]
Acetaldehído	125,51	98,25	46,23	269,99
Acetato de etilo	98,2	82,13	13,7	194,03
2-butanol	79,34	33,83	41,58	154,75
1-propanol	232,31	190,03	93,23	515,57
1-butanol	15,79	11,2	0	26,99
2-metil-1-propanol	489,81	301,3	120,31	911,42
2-metil-1-butanol	141,35	120,87	129,39	391,61
3-metil-1-butanol	879,32	751,44	425,19	2055,95
Ácido acético	25,65	21,78	20,01	67,44
Total	2087,28	1610,83	889,64	4587,75

Ejemplo de cálculo para el destilado total para el Acetaldehído.

$$D_T = D_{Cabeza} + D_{corazón} + D_{colas}$$
$$D_T = (125,51 + 98,25 + 46,23) \frac{mg}{L}$$
$$D_T = 269,99 \frac{mg}{L}$$

Se conoce que 46,24 g lactosa/L de suero de leche ingresan a la fermentación, donde se obtiene 29,53 g etanol/L de suero de leche.

Cálculo del destilado más el etanol producido.

$$D = D_T + Et$$
$$D = (4,59 + 29,53) \frac{g}{L}$$
$$D = 34,12 \frac{g}{L}$$

Cálculo de la masa de los compuestos volátiles.

$$m_{cv} = 34,12 \frac{g}{L} * 0,4 L$$
$$m_{cv} = 13,64 g$$
$$m_{cV} = 13647,1 mg$$

Cálculo de masa de agua contenida en el producto de fermentación.

$$m_{PF} = m_V + m_a$$
$$m_a = (409,75 - 13,64)g$$
$$m_a = 396,10 g$$
$$m_a = 396102,9 mg$$

En la Tabla A1.2 se encuentran tabuladas la composición para los compuestos volátiles obtenidos en la destilación.

Tabla A1.2. Composición másica del destilado.

Compuesto	Masa de destilado [mg]	Composición [% mol]
Acetaldehído	107,996	0,03
Acetato de etilo	77,612	0,02
2-butanol	61,9	0,02
1-propanol	206,228	0,05
1-butanol	10,796	0,003
2-metil-1-propanol	364,568	0,09
2-metil-1-butanol	156,644	0,04
3-metil-1-butanol	822,38	0,20
Ácido acético	26,976	0,01
Etanol	11812	2,88
Agua	396102,9	96,67
Total	409750	100

Ejemplo de cálculo de la composición másica para el etanol.

$$\%_{et} = \frac{396102,9}{409750} * 100$$

$$\%_{et} = 96,67\%$$

ANEXO II

Curva de ELV para la mezcla etanol-agua.

A partir de los datos experimentales presentados en la Tabla AII.1, se graficó curva de ELV de la mezcla etanol-agua con una relación Solvente/Alimentación igual a 0.53.

Tabla AII.1. Datos experimentales para la curva ELV

X	Y
0	0
0,001	0,0012
0,00548	0,03102
0,00837	0,06173
0,01094	0,08889
0,01543	0,14764
0,02313	0,22198
0,03277	0,33682
0,04462	0,42718
0,05584	0,50508
0,07311	0,54914
0,10029	0,59097
0,12682	0,62345
0,1933	0,67015
0,30867	0,71148
0,41476	0,74036
0,52725	0,77235
0,62248	0,80479
0,80208	0,88259
0,88805	0,92928
0,95645	0,97198
0,9964	0,99733
1	1

En la Tabla AII.2 Se pueden observar las concentraciones de entrada y de salida para la curva de ELV.

Tabla AII.2. Parámetros empleados en la curva ELV para S/F igual a 0,53.

Parámetros	
X_D	0,996
Y_F	0,92
X_{ZF}	0,88

Cálculo de reciclo mínimo y reciclo óptimo.

$$R_{min} = \frac{XD - YF}{YF - XF}$$
$$R_{min} = \frac{0,996 - 0,92}{0,92 - 0,88}$$
$$R_{min} = 1,9$$
$$R_{op} = 1,5 * 1,9$$
$$R_{op} = 2,85$$

Cálculo de la Recta de operación en la zona de enriquecimiento

$$ROE = \frac{R_{min}}{1 + R_{min}}x + \frac{XD}{1 + R_{op}}$$
$$ROE = \frac{1,9}{1 + 1,9}x + \frac{0,996}{1 + 2,85}$$
$$ROE = 0,7403x + 0,259$$

ANEXO III

Cálculo los flujos de la columna de destilación en estado estacionario.

Balance de Masa por componente.

$$F * x_{i,o} = D * x_{i,D}$$
$$100 \frac{Kmol}{h} * 0,88 = D * 0,996$$
$$D = 88,35 \frac{kmol}{h}$$

Se calculó el flujo del líquido y consideró una relación de reflujo (R) de 1,35.

$$L = R * D$$
$$L = 1,35 * 88,35 \frac{kmol}{h}$$
$$L = 119,28 \frac{kmol}{h}$$

Cálculo del flujo de vapor

$$V = D + L$$
$$V = (88,35 + 119,28) \frac{kmol}{h}$$
$$V = 207,63 \frac{kmol}{h}$$

Cálculo de la velocidad de vapor.

$$\mu = K * \sqrt{\frac{\rho_L - \rho_V}{\rho_L}}$$
$$\mu = 0,017 * \sqrt{\frac{21,978 - 0,034}{21,978}}$$
$$\mu = 0,016 \text{ m/s}$$

Cálculo del diámetro de la columna

$$\begin{aligned}\phi &= \sqrt{\frac{4V * 22,4(273 + T) * 760}{\pi * \mu * 3600 * P * 273}} \\ \phi &= \sqrt{\frac{4(207,63 \frac{kmol}{h}) * 22,4(273 + 100.0006^\circ C) * 760}{\pi * 0,017 * 3600 * 760 \text{ mmHg} * 273}} \\ \phi &= 11,50 \text{ m}\end{aligned}$$

Cálculo del área de la columna de destilación.

$$\begin{aligned}Ac &= \pi * \frac{\phi^2}{4} \\ Ac &= \pi * \frac{11,50^2}{4} \\ Ac &= 103,91 \text{ m}^2\end{aligned}$$

Área que ocupa cada plato.

$$\begin{aligned}Ap &= 0,7 * 103,91 \text{ m}^2 \\ Ap &= 72,74 \text{ m}^2\end{aligned}$$

Cálculo de Lw

$$\begin{aligned}Lw &= 1,62 * \frac{\phi}{2} \\ Lw &= 1,62 * \frac{11,50 \text{ m}}{2} \\ Lw &= 9,32 \text{ m}\end{aligned}$$

Cálculo de la altura del vertedero

$$\begin{aligned}how &= 43,4 * \left(\frac{ql}{Lw}\right)^{2/3} \\ how &= 43,4 * \left(\frac{0,0021}{9.32}\right)^{2/3}\end{aligned}$$

$$h_{ow} = 0,16 \text{ m}$$

Cálculo de la altura del vertedero y se considera β de 0,6 y h_w de 50 mm

$$hl = \beta' * (h_w + h_{ow})$$

$$hl = 0,6 * (0,16 + 0,05)\text{m}$$

$$hl = 0,12 \text{ m}$$

Cálculo del volumen del plato.

$$V = hl * A_p$$

$$V = 0,13\text{m} * 72,74\text{m}^2$$

$$V = 9,2 \text{ m}^3$$

Cálculo de la Masa retenida en cada plato.

$$M = \rho * V$$

$$M = 45,25 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}} * 9,6 \text{ m}^3$$

$$M = 416,11 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}}$$

ANEXO IV

Consistencia matemática del número de ecuaciones, número de variables conocidas y desconocidas.

Tabla AIV.1. Variables Conocidas.

Variables Conocidas	Símbolo
Flujo de Alimentación del Azeótropo	F
Flujo de alimentación del Solvente	F_s
Concentración inicial de líquido para etanol, agua y glicerol	$x_{1,0}, x_{2,0}, x_{3,0}$
Concentración inicial de vapor para etanol, agua y glicerol	$y_{1,0}, y_{2,0}, y_{3,0}$
Constantes de Antoine	A1, B1, C1 A2, B2, C2 A3, B3, C3
Parámetros NRTL	a12, a21, a13, a31, a23, a32 b12, b21, b13, b31, b23, b32
Parámetro de ajuste	α
Presión total	Pt
Total	19

En la Tabla AIV.2 se muestran las variables desconocidas.

Tabla AIV.2. Variables Desconocidas.

Variables desconocidas	Símbolo
Composición líquida de etanol, agua y glicerol	y_1, y_2, Y_3
Composición vapor de etanol, agua y glicerol	x_1, x_2, x_3
Temperatura	T
Flujo de Líquido	L
Flujo de Vapor	V
Flujo de Destilado	D
Masa retenida en cada plato	M
Entalpía de vaporización	H
Coeficiente de actividad	k_1, k_2, k_3
Parámetros NRTL	Tao12, tao13, tao21 Tao23, tao31, tao32 Tao11, tao22, tao33 G12, G13, G21 G23, G31, G32 G11, G22, G33
Total	33

En la Tabla AIV.3 se observa el número de ecuaciones, para calcular los grados de libertad se resta el número de ecuaciones de las variables desconocidas y de las variables conocidas, el valor obtenido es de cero, es decir que es un sistema que tiene solución.

Tabla IV.3. Número de ecuaciones

Ecuación	Número de ecuaciones
Ley de Raoult Modificada	3
Balance de Masa	3
Ecuación de Antoine	3
Ecuación de equilibrio	3
Sumatoria de fracciones molares de líquido	1
Balance de Energía	1
Total	14

Cálculo de los grados de libertad

$$GL = Ecuaciones - (V_{Conocidas} - V_{Desconocidas})$$

$$GL = 14 - (33 - 19)$$

$$GL = 0$$

ANEXO V

Códigos de Matlab

Función

```
function [Tmedr, y1r, y2r, y3r] = function_k2(x1, x2, x3)
global A B C a12 a21 a13 a31 a23 a32 b12 b21 b13 b31 b23 b32 alfn Pt
syms Tmed y1 y2 y3
%Cálculo de parámetros NRTL
tao11=0;
tao12=a12+ (b12/(Tmed+273.15));
tao13=a13+ (b13/(Tmed+273.15));
tao21=a21+ (b21/(Tmed+273.15));
tao22=0;
tao23=a23+ (b23/(Tmed+273.15));
tao31=a31+ (b31/(Tmed+273.15));
tao32=a32+ (b32/(Tmed+273.15));
tao33=0;
G11=exp(-tao11*alfn);
G12=exp(-tao12*alfn);
G13=exp(-tao13*alfn);
G21=exp(-tao21*alfn);
G22=exp(-tao22*alfn);
G23=exp(-tao23*alfn);
G31=exp(-tao31*alfn);
G32=exp(-tao32*alfn);
G33=exp(-tao33*alfn);
%Cálculo de numeradores y denominadores para gama
Num11=G11.*x1;
Num12=G12.*x2;
Num13=G13.*x3;
Num21=G21.*x1;
Num22=G22.*x2;
Num23=G23.*x3;
Num31=G31.*x1;
Num32=G32.*x2;
Num33=G33.*x3;
N11=(tao11*G11*x1)+(tao21*G21*x2)+(tao31*G31*x3);
N12=(tao12*G12*x1)+(tao22*G22*x2)+(tao32*G32*x3);
N13=(tao13*G13*x1)+(tao23*G23*x2)+(tao33*G33*x3);
denom11=G11*x1+G21*x2+G31*x3;
denom12=G12*x1+G22*x2+G32*x3;
denom13=G13*x1+G23*x2+G33*x3;
%Cálculo de gama
gama11=exp(N11./denom11+(((Num11./denom11)*(tao11-
(N11./denom11)))+(Num12./denom12)*(tao12-
(N12./denom12)))+(Num13./denom13)*(tao13-
(N13./denom13))));
gama12=exp(N12./denom12+(((Num21./denom11)*(tao21-
(N11./denom11)))+(Num22./denom12)*(tao22-
(N12./denom12)))+(Num23./denom13)*(tao23-
(N13./denom13))));
gama13=exp(N13./denom13+(((Num31./denom11)*(tao31-
(N11./denom11)))+(Num32./denom12)*(tao32-
(N12./denom12)))+(Num33./denom13)*(tao33-
(N13./denom13))));
%Cálculo de Presión de saturación
P1=(10^(A(1)-(B(1)/(C(1)+Tmed))));%kPa
P2=(10^(A(2)-(B(2)/(C(2)+Tmed))));%kPa
```

```
P3=(10^(A(3)-(B(3)/(C(3)+Tmed))));%kPa
```

```
%Cálculo de k
```

```
k1=gama11*P1./Pt;
```

```
k2=gama12*P2./Pt;
```

```
k3=gama13*P3./Pt;
```

```
%Ley de Raoult modificada
```

```
eq1=y1+y2+y3==1;
```

```
eq2=y1==k1*x1;
```

```
eq3=y2==k2*x2;
```

```
eq4=y3==k3*x3;
```

```
[Tmedr, y1r, y2r, y3r]=vpasolve([eq1 eq2 eq3 eq4], [Tmed y1 y2 y3]);
```

```
end
```

Destilación

```
%% Trabajo de Integración Curricular
```

```
% MODELADO Y SIMULACIÓN DE PROCESOS INVOLUCRADOS EN LA PRODUCCIÓN DE  
BIOETANOL A PARTIR DE SUERO DE LECHE
```

```
% Autora: Kelly Montero
```

```
% Quito, Febrero 2022
```

```
% Liberar memoria, reset consola de comandos
```

```
clc; clear; close all;
```

```
%
```

```
*****
```

```
%% Definición de variables
```

```
% Considerar: 1=Etanol, 2=Agua, 3=Glicerol;
```

```
% Los flujos están en kmol/h y se calculan en base a una alimentación F
```

```
% de 100 moles/min y una alimentación de solvente FS de 53 kmol/h;
```

```
F=100; % Alimentación del azeótropo [kmol/h]
```

```
FS=53; % Alimentación del solvente [kmol/h]
```

```
D=0.88*100/0.996; % Flujo de Destilado [kmol/h]
```

```
RR=1.35; %Relación de Reflujo
```

```
L=RR*D; %Flujo de líquido [kmol/h]
```

```
V=D+L; %Flujo de vapor [kmol/h]
```

```
dt=0.1; %intervalo de tiempo discreto para Euler
```

```
M=416.11; %masa acumulada en el rebosadero de cada plato [kmol/h]
```

```
Lo=L; %Flujo de líquido que ingresa al primer plato [kmol/h]
```

```
xsol=FS/L; %Cantidad de slvente por el líquido en la columna [kmol/h]
```

```
NP=11; %Número de platos
```

```
t=1500; %tiempo
```

```
TF=78.2; %Temperatura de alimentación
```

```
tt=t; %tiempo
```

```
nc=3; % número de compuesto
```

```
%
```

```
*****
```

```
%% Datos de la columna de destilación
```

```
global A B C a12 a21 a13 a31 a23 a32 b12 b21 b13 b31 b23 b32 alfn Pt
```

```
Pt=760; % Presión de operación de la columna[mmHg]
```

```
% Constantes Ec Antoine
```

```
% Etanol T(°C) P(mmHg)
```

```
A=[];
```

```

B=[];
C=[];

A(1)=8.1122;
B(1)=1592.864;
C(1)=226.184;

%Agua T(°C) P(mmHg)
A(2)=7.96681;
B(2)=1668.21;
C(2)=228;

%Glicerina T(°C) P(mmHg)
A(3)=6.16501;
B(3)=1036.056;
C(3)=28.097;

%Parámetros NRTL

a12=3.4578;
a21=-0.8009;
a13=0;
a31=0;
a23=-1.2515;
a32=-0.7318;

b12=-586.0809;
b21=246.18;
b13=442.713;
b31=36.1390;
b23=272.6075;
b32=170.9167;
alfn=0.3;

%
*****
%% Creación de vectores para cada plato (tiempo, compuesto)
%Composición líquido
PA=zeros(1,nc-1);
P1x=zeros(t+1,nc);
P2x=zeros(t+1,nc);
P3x=zeros(t+1,nc);
P4x=zeros(t+1,nc);
P5x=zeros(t+1,nc);
P6x=zeros(t+1,nc);
P7x=zeros(t+1,nc);
P8x=zeros(t+1,nc);
P9x=zeros(t+1,nc);
P10x=zeros(t+1,nc);
P11x=zeros(t+1,nc);
P12x=zeros(t+1,nc);
P13x=zeros(t+1,nc);
P14x=zeros(t+1,nc);
%Composición vapor
P1y=zeros(t+1,nc);
P2y=zeros(t+1,nc);
P3y=zeros(t+1,nc);
P4y=zeros(t+1,nc);
P5y=zeros(t+1,nc);

```

```

P6y=zeros (t+1,nc);
P7y=zeros (t+1,nc);
P8y=zeros (t+1,nc);
P9y=zeros (t+1,nc);
P10y=zeros (t+1,nc);
P11y=zeros (t+1,nc);

%Condensador
Dx=zeros (t+1,3);
Dy=zeros (t+1,3);
ED=zeros (t+1,1);

%Para Temperatura
T=zeros (t+1,NP+1);

%tiempo
t=zeros (t+1,1);

%
*****
%% Inicialización de variables
%tiempo
t (1,1)=0;
% Compuestos
x1o=0;      x2o=0;      x3o=0;
%solvente
x3s=1;
%Condensador
Dx (1,1)=x1o;

%Composición inicial del líquido
P1x (1,1)=x1o;  P1x (1,2)=x2o;  P1x (1,3)=x3o;
P2x (1,1)=x1o;  P2x (1,2)=x2o;  P2x (1,3)=x3o;
P3x (1,1)=x1o;  P3x (1,2)=x2o;  P3x (1,3)=x3o;
P4x (1,1)=x1o;  P4x (1,2)=x2o;  P4x (1,3)=x3o;
P5x (1,1)=x1o;  P5x (1,2)=x2o;  P5x (1,3)=x3o;
P6x (1,1)=x1o;  P6x (1,2)=x2o;  P6x (1,3)=x3o;
P7x (1,1)=x1o;  P7x (1,2)=x2o;  P7x (1,3)=x3o;
P8x (1,1)=x1o;  P8x (1,2)=x2o;  P8x (1,3)=x3o;
P9x (1,1)=x1o;  P9x (1,2)=x2o;  P9x (1,3)=x3o;
P10x (1,1)=x1o; P10x (1,2)=x2o; P10x (1,3)=x3o;
P11x (1,1)=x1o; P11x (1,2)=x2o; P11x (1,3)=x3o;
PA (1,1)=0.88;  PA (1,2)=1-0.88;

%
*****
% Inicialización de composición vapor
y1=0;      y2=0;      y3=0;
% Composición inicial de vapor
P1y (1,1)=y1;  P1y (1,2)=y2;  P1y (1,3)=y3;
P2y (1,1)=y1;  P2y (1,2)=y2;  P2y (1,3)=y3;
P3y (1,1)=y1;  P3y (1,2)=y2;  P3y (1,3)=y3;
P4y (1,1)=y1;  P4y (1,2)=y2;  P4y (1,3)=y3;
P5y (1,1)=y1;  P5y (1,2)=y2;  P5y (1,3)=y3;
P6y (1,1)=y1;  P6y (1,2)=y2;  P6y (1,3)=y3;
P7y (1,1)=y1;  P7y (1,2)=y2;  P7y (1,3)=y3;
P8y (1,1)=y1;  P8y (1,2)=y2;  P8y (1,3)=y3;
P9y (1,1)=y1;  P9y (1,2)=y2;  P9y (1,3)=y3;
P10y (1,1)=y1; P10y (1,2)=y2; P10y (1,3)=y3;

```

```

P1ly(1,1)=y1;   P1ly(1,2)=y2;   P1ly(1,3)=y3;

%Condensador
Dy(1,1)=y1;     Dy(1,2)=y2;     Dy(1,3)=y3;

%
*****
%% Balance de Energía
%Cálculo de Entalpía de vaporización Condensador

tr_et(1,1)=(TF+273)/514;
tr_agua(1,1)=(TF+273)/647.096;
hv_et(1,1)=((5.5789*10^7)*(1-tr_et(1,1))^0.31245)/1000;
hv_agua(1,1)=((5.2053*10^7)*(1-tr_agua(1,1))^(0.3199-
0.212*tr_agua(1,1)+0.25795*(tr_agua(1,1))^2))/1000;
hvc(1,1)=Dx(1,1)*hv_et(1,1)+(1-Dx(1,1))*hv_agua(1,1);
ED(1,1)=-V*hvc(1,1);

%
*****
%% Cálculo de las variables en función del tiempo para cada plato
for i=1:tt

    %Condensador
    funcionD(i,1)=(V*Ply(i,1)-D*Dx(i,1)-L*Dx(i,1))./M;
    Dx(i+1,1)=funcionD(i,1)*dt+Dx(i,1);
%    funcionD(i,3)=(V*Ply(i,3)-D*Dx(i,3)-L*Dx(i,3))./M;
%    Dx(i+1,3)=funcionD(i,3)*dt+Dx(i,3);
    Dx(i+1,3)=0;
    Dx(i+1,2)=1-Dx(i+1,1)-Dx(i+1,3);

    [T(i,1), Dy(i+1,1), Dy(i+1,2),
Dy(i+1,3)]=function_k2(Dx(i+1,1),Dx(i+1,2),Dx(i+1,3));

    %Plato 1
    for j=1:nc
        funcion1(i,j)=(Lo*Dx(i,1)+V*P2y(i,j)-L*P1x(i,j)-V*Ply(i,j))./M;
        P1x(i+1,j)=funcion1(i,j)*dt+P1x(i,j);
    end
    P1x(i+1,3)=0;
    P1x(i+1,2)=1-P1x(i+1,3)-P1x(i+1,1);
    [T(i,2), P1y(i+1,1),
P1y(i+1,2),P1y(i+1,3)]=function_k2(P1x(i+1,1),P1x(i+1,2),P1x(i+1,3));

    %Plato 2
    for j=1:nc
        funcion2(i,j)=(L*P1x(i,j)+V*P3y(i,j)-L*P2x(i,j)-V*P2y(i,j))./M;
        P2x(i+1,j)=funcion2(i,j)*dt+P2x(i,j);
    end

    P2x(i+1,3)=0;
    P2x(i+1,2)=1-P2x(i+1,3)-P2x(i+1,1);
    [T(i,3), P2y(i+1,1), P2y(i+1,2),
P2y(i+1,3)]=function_k2(P2x(i+1,1),P2x(i+1,2),P2x(i+1,3));

    %Plato 3: ALIMENTACIÓN SOLVENTE

    funcion3(i,1)=(L*P2x(i,1)+V*P4y(i,1)-L*P3x(i,1)-V*P3y(i,1))./M;

```



```

P3x(i+1,1)=funcion3(i,1)*dt+P3x(i,1);
funcion3(i,3)=(L*P2x(i,3)+V*P4y(i,3)-L*P3x(i,3)-
V*P3y(i,3)+FS*x3s)/M;
P3x(i+1,3)=funcion3(i,3)*dt+P3x(i,3);

P3x(i+1,2)=1-P3x(i+1,3)-P3x(i+1,1);

[T(i,4), P3y(i+1,1), P3y(i+1,2),
P3y(i+1,3)]=function_k2(P3x(i+1,1),P3x(i+1,2),P3x(i+1,3));

%Plato 4
for j=1:nc
    funcion4(i,j)=(L*P3x(i,j)+V*P5y(i,j)-L*P4x(i,j)-V*P4y(i,j))./M;
    P4x(i+1,j)=funcion4(i,j)*dt+P4x(i,j);
end
P4x(i+1,2)=1-P4x(i+1,3)-P4x(i+1,1);
[T(i,5), P4y(i+1,1), P4y(i+1,2),
P4y(i+1,3)]=function_k2(P4x(i+1,1),P4x(i+1,2),P4x(i+1,3));

%Plato 5
for j=1:nc
    funcion5(i,j)=(L*P4x(i,j)+V*P6y(i,j)-L*P5x(i,j)-V*P5y(i,j))./M;
    P5x(i+1,j)=funcion5(i,j)*dt+P5x(i,j);
end
P5x(i+1,2)=1-P5x(i+1,3)-P5x(i+1,1);
[T(i,6), P5y(i+1,1), P5y(i+1,2),
P5y(i+1,3)]=function_k2(P5x(i+1,1),P5x(i+1,2),P5x(i+1,3));

%Plato 6
for j=1:nc
    funcion6(i,j)=(L*P5x(i,j)+V*P7y(i,j)-L*P6x(i,j)-V*P6y(i,j))./M;
    P6x(i+1,j)=funcion6(i,j)*dt+P6x(i,j);
end
P6x(i+1,2)=1-P6x(i+1,3)-P6x(i+1,1);
[T(i,7), P6y(i+1,1), P6y(i+1,2),
P6y(i+1,3)]=function_k2(P6x(i+1,1),P6x(i+1,2),P6x(i+1,3));

%Plato 7: ALIMENTACIÓN AZEÓTROPO
for j=1:nc-1
    funcion7(i,j)=(L*P6x(i,j)+V*P8y(i,j)-L*P7x(i,j)-
V*P7y(i,j)+F*PA(1,j))./M;
    P7x(i+1,j)=funcion7(i,j)*dt+P7x(i,j);
    funcion7(i,3)=(L*P6x(i,3)+V*P8y(i,3)-L*P7x(i,3)-V*P7y(i,3))./M;
    P7x(i+1,3)=funcion7(i,3)*dt+P7x(i,3);
end
P7x(i+1,2)=1-P7x(i+1,3)-P7x(i+1,1);
[T(i,8), P7y(i+1,1), P7y(i+1,2),
P7y(i+1,3)]=function_k2(P7x(i+1,1),P7x(i+1,2),P7x(i+1,3));

%Plato 8
for j=1:nc
    funcion8(i,j)=(L*P7x(i,j)+V*P9y(i,j)-L*P8x(i,j)-V*P8y(i,j))./M;
    P8x(i+1,j)=funcion8(i,j)*dt+P8x(i,j);
end
P8x(i+1,2)=1-P8x(i+1,3)-P8x(i+1,1);
[T(i,9), P8y(i+1,1), P8y(i+1,2),
P8y(i+1,3)]=function_k2(P8x(i+1,1),P8x(i+1,2),P8x(i+1,3));

```

```

%Plato 9
for j=1:nc
    funcion9(i,j)=(L*P8x(i,j)+V*P10y(i,j)-L*P9x(i,j)-V*P9y(i,j))./M;
    P9x(i+1,j)=funcion9(i,j)*dt+P9x(i,j);
end
P9x(i+1,2)=1-P9x(i+1,3)-P9x(i+1,1);
[T(i,10), P9y(i+1,1), P9y(i+1,2),
P9y(i+1,3)]=function_k2(P9x(i+1,1),P9x(i+1,2),P9x(i+1,3));

%Plato 10
for j=1:nc
    funcion10(i,j)=(L*P9x(i,j)+V*P11y(i,j)-L*P10x(i,j)-
V*P10y(i,j))./M;
    P10x(i+1,j)=funcion10(i,j)*dt+P10x(i,j);
end
P10x(i+1,2)=1-P10x(i+1,3)-P10x(i+1,1);
[T(i,11), P10y(i+1,1), P10y(i+1,2),
P10y(i+1,3)]=function_k2(P10x(i+1,1),P10x(i+1,2),P10x(i+1,3));

%Plato 11
for j=1:nc
    funcion11(i,j)=(L*P10x(i,j)-L*P11x(i,j)-V*P11y(i,j))./M;
    P11x(i+1,j)=funcion11(i,j)*dt+P11x(i,j);
end
P11x(i+1,2)=1-P11x(i+1,3)-P11x(i+1,1);
[T(i,12), P11y(i+1,1), P11y(i+1,2),
P11y(i+1,3)]=function_k2(P11x(i+1,1),P11x(i+1,2),P11x(i+1,3));

%% Cuantificación de Energía
tr_et(i+1,1)=(T(i+1,1)+273)/514;
tr_agua(i+1,1)=(T(i+1,1)+273)/647.096;
hv_et(i+1,1)=((5.5789*10^7)*(1-tr_et(i+1,1))^0.31245)/1000;
hv_agua(i+1,1)=((5.2053*10^7)*(1-tr_agua(i+1,1))^(0.3199-
0.212*tr_agua(i+1,1)+0.25795*(tr_agua(i+1,1))^2))/1000;
hvc(i+1,1)=Dx(i+1,1)*hv_et(i+1,1)+(1-Dx(i+1,1))*hv_agua(i+1,1);
ED(i+1,1)=V*hvc(i+1,1);

t(i+1)=t(i)+dt;
end

%
*****
%% Gráfica de concentraciones en función del tiempo
figure(1)
%Concentración de etanol en estado líquido
plot(t,Dx(:,1),'-')
hold on
plot(t,P1x(:,1));grid on
hold on
plot(t,P2x(:,1))
hold on
plot(t,P3x(:,1))
hold on
plot(t,P4x(:,1))
hold on

```

```

plot(t,P5x(:,1))
hold on
plot(t,P6x(:,1))
hold on
plot(t,P7x(:,1))
hold on
legend('Condensador', 'Plato 1','Plato 2','Plato 3','Plato 4','Plato
5','Plato 6','Plato 7')
xlabel('Tiempo [h]')
ylabel('Fracción líquida de etanol (x)')

```

```

figure (2)
plot(t,P8x(:,1))
hold on
grid on
plot(t,P9x(:,1))
hold on
plot(t,P10x(:,1))
hold on
plot(t,P11x(:,1))
hold on
legend('Plato 8','Plato 9','Plato 10','Plato 11')
xlabel('Tiempo [h]')
ylabel('Fracción líquida de etanol (x)')

```

```

figure(3)
%Concentración de etanol en vapor
plot(t,Dy(:,1))
hold on
plot(t,P1y(:,1));grid on
hold on
plot(t,P2y(:,1))
hold on
plot(t,P3y(:,1))
hold on
plot(t,P4y(:,1))
hold on
plot(t,P5y(:,1))
hold on
plot(t,P6y(:,1))
hold on
plot(t,P7y(:,1))
hold on
legend('Condensador', 'Plato 1','Plato 2','Plato 3','Plato 4','Plato
5','Plato 6','Plato 7')
xlabel('Tiempo [h]')
ylabel('Fracción en vapor de etanol (y)')

```

```

figure (4)
plot(t,P8y(:,1))
hold on
grid on
plot(t,P9y(:,1))
hold on
plot(t,P10y(:,1))
hold on
plot(t,P11y(:,1))
hold on
legend('Plato 8','Plato 9','Plato 10','Plato 11')

```

```

xlabel('Tiempo [h]')
ylabel('Fracción en vapor de etanol (y)')

%Variación de la temperatura en función del tiempo para cada plato
figure(5)
plot(t, T(:,1))
grid on
hold on
plot(t,T(:,2))
hold on
plot(t,T(:,3))
hold on
plot(t,T(:,4))
hold on

legend('Condensador', 'Plato 1', 'Plato 2', 'Plato 3')
xlabel('Tiempo [h]')
ylabel('Temperatura [°C]')

figure (6)
plot(t,T(:,5))
hold on
plot(t,T(:,6))
hold on
plot(t,T(:,7))
hold on
plot(t,T(:,8))
hold on
grid on
plot(t,T(:,9))
hold on
plot(t,T(:,10))
hold on
plot(t,T(:,11))
hold on
plot(t,T(:,12))
hold on
legend('Plato 4', 'Plato 5', 'Plato 6', 'Plato 7', 'Plato 8', 'Plato 9', 'Plato
10', 'Plato 11')
xlabel('Tiempo [h]')
ylabel('Temperatura [°C]')

figure(7)
plot(t,ED(:,1))
xlabel('Tiempo [h]')
ylabel('Energía del Condensador [MJ]')
hold on

```

ANEXO VI

Perfiles dinámicos para la fracción molar del vapor.

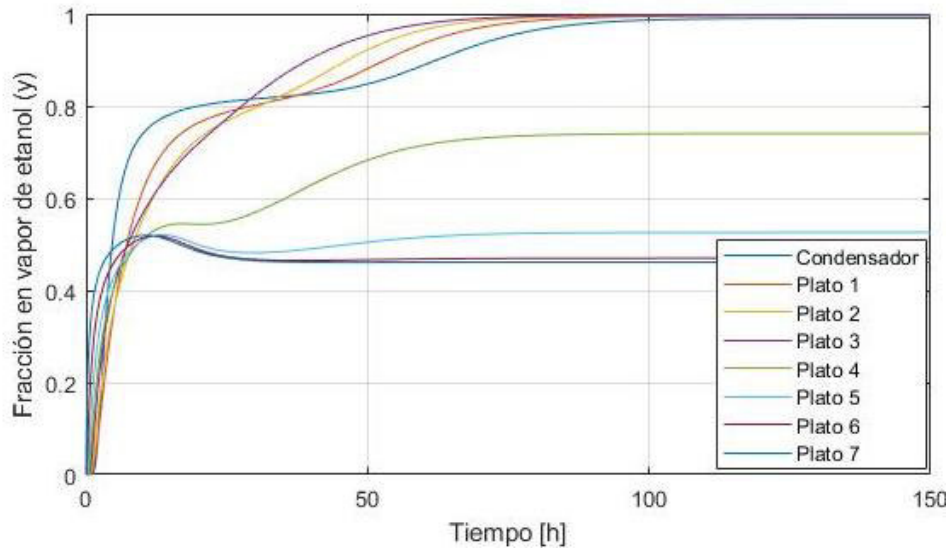


Figura VI.1. Perfil dinámico para la fracción en vapor de etanol en la zona de enriquecimiento.

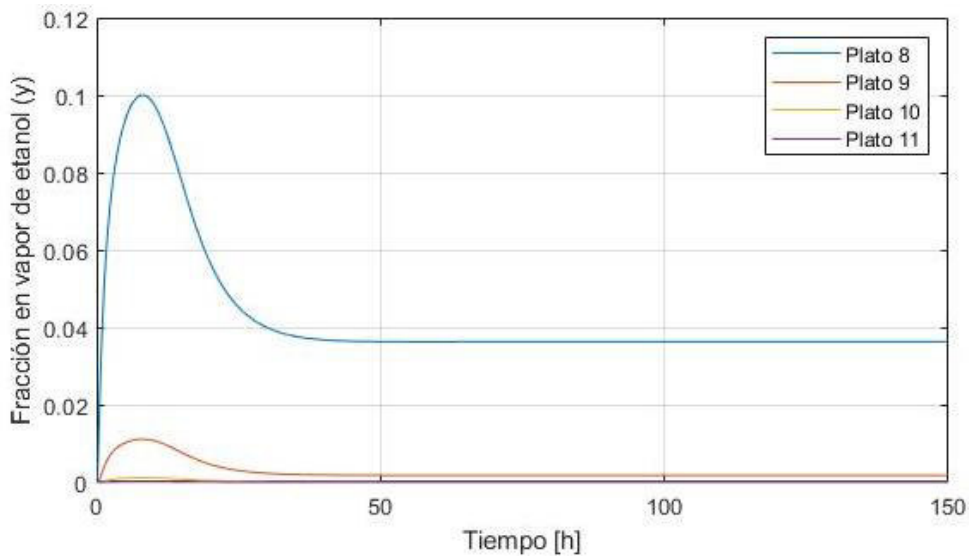


Figura VI.1. Perfil dinámico para la fracción en vapor de etanol en la zona de agotamiento.