

# **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**

### **SIMULACIÓN DE LA DESTILACIÓN SIMPLE DEL FERMENTADO DE SUERO DE LECHE PREVIAMENTE PURIFICADO PARA LA OBTENCIÓN DE ETANOL**

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

**GRACE KERLY MARTÍNEZ BENAVIDES**

**[grace.martinez@epn.edu.ec](mailto:grace.martinez@epn.edu.ec)**

**DIRECTOR: MARÍA AUGUSTA PÁEZ LARA**

**[maria.paez@epn.edu.ec](mailto:maria.paez@epn.edu.ec)**

**DMQ, febrero 2022**

## **CERTIFICACIONES**

Yo, GRACE KERLY MARTÍNEZ BENAVIDES 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.

---

**GRACE MARTÍNEZ**

Certifico que el presente trabajo de integración curricular fue desarrollado por GRACE KERLY MARTÍNEZ BENAVIDES, 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 producto resultante 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.

GRACE KERLY MARTÍNEZ BENAVIDES

MARÍA AUGUSTA PÁEZ LARA

## **DEDICATORIA**

Dedico esta investigación a mi madre por ser mi pilar fundamental, creer en mí a pesar de las dificultades que se presentaron durante este proceso y esforzarse día tras día para darme la mejor formación académica y moral.

A mi padre por ser gran fuente de apoyo y protegerme a lo largo de toda mi vida.

A Dios que es mi fuerza e inspiración, gracias a él he logrado todo lo que me he propuesto.

## **AGRADECIMIENTO**

Mis agradecimientos a la MSc. María Augusta Páez por su admirable guía y ayuda a lo largo del desarrollo y creación de este proyecto, fue la dedicación y paciencia de ella lo que me alentaron en la conclusión de la investigación.

Son muchos los docentes que han contribuido en mi formación profesional, a todos ellos les agradezco ya que siempre han estado dispuestos a ser un apoyo en cada nuevo desafío que se presentaba semestre tras semestre.

Por último, quiero agradecer a la Escuela Politécnica Nacional por permitir mi formación académica en sus instalaciones, además de brindarme soporte de todo tipo durante mi paso por la institución

## ÍNDICE DE CONTENIDO

CERTIFICACIONES .....	I
DECLARACIÓN DE AUTORÍA .....	II
DEDICATORIA.....	III
AGRADECIMIENTO .....	IV
ÍNDICE DE CONTENIDO .....	V
RESUMEN .....	VI
ABSTRACT .....	VII
1 INTRODUCCIÓN.....	<b>¡Error! Marcador no definido.</b>
1.1 Objetivo general.....	2
1.2 Objetivos específicos.....	Z
1.3 Alcance .....	2
1.4 Marco teórico .....	3
2 METODOLOGÍA.....	11
3 RESULTADOS, CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.....	24
3.1 Resultados .....	24
3.2 Conclusiones .....	32
3.3 Recomendaciones .....	33
4 REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	33
5 ANEXOS.....	35

## RESUMEN

La destilación simple es un proceso de purificación que se basa en la diferencia de volatilidades y se aplica principalmente a mezclas binarias o multicomponentes cuyas temperaturas de ebullición difieren de al menos 10°C. La destilación de mezclas provenientes de fermentaciones alcohólicas es un proceso convencional, en el cual la presencia de etanol-agua lo convierte en un sistema no ideal. Como mezcla binaria etanol-agua, el sistema presenta un azeótropo cuando la composición molar es del 88 %, lo que refleja la necesidad de un análisis del equilibrio líquido-vapor considerando los coeficientes de actividad. Para ello, los modelos termodinámicos NRTL y UNIQUAC son la mejor alternativa pues se describen con alta precisión el comportamiento real de estas mezclas.

El presente proyecto tiene por objetivo realizar la simulación de la destilación simple del fermentado de suero de leche para obtener etanol azeotrópico mediante la utilización de los modelos NRTL y UNIQUAC. Para ello, se determinó el número de platos teóricos y el plato de alimentación mediante el método gráfico de McCabe Thiele. Se realizó la simulación de la destilación mediante el software de procesos Aspen HYSYS V12.1. Se determinó que el modelo NRTL es el más idóneo para la destilación del fermentado de lactosuero debido a que se logra un porcentaje de recuperación y una pureza más cercanas a valores reportados experimentalmente. Además, se estableció el nivel de influencia de la relación de reflujo, pues un incremento de reflujo genera un destilado de mayor pureza y un mayor porcentaje de recuperación.

**PALABRAS CLAVE:** destilación, coeficiente de actividad, equilibrio líquido-vapor, azeótropo.

## ABSTRACT

Simple distillation is a purification process based on volatilities difference, and is mainly applied to binary or multicomponent mixtures whose boiling temperatures differ by at least 10°C. The distillation of alcoholic fermentation products has become a conventional process due to the low concentration of ethanol, which can be envisaged as non-ideal system as it presents an azeotrope at the 88% mole fraction. In this context, the liquid-vapor equilibrium analysis requires the incorporation of activity coefficients. The thermodynamic models NRTL and UNIQUAC are the likely alternative to describe the real behavior of these kind of mixtures.

This project aims to simulate the simple distillation of whey fermentation product to achieve an 88 % mol ethanol by means of NRTL and UNIQUAC models. For this purpose, the number of theoretical plates and the feeding plate were determined through McCabe Thiele graphical method. A distillation simulation was carried out in Aspen HYSYS V12.1 process software. It was found that NRTL model is the most suitable for the fermented whey since product purity and recovery percentage are like those experimentally attained. In addition, the reflux ratio influence levels were established, since it was demonstrated that an increase in reflux promotes higher purity product and higher percentage of recovery.

**KEYWORDS:** activity coefficient, vapor-liquid equilibrium, azeotrope



# 1 DESCRIPCIÓN DEL COMPONENTE DESARROLLADO

La destilación simple es un proceso de purificación que se basa en la diferencia de volatilidades. Se aplica a mezclas con diferencias de al menos 10°C entre los puntos de ebullición de sus componentes, siendo la destilación de mezclas provenientes de fermentaciones alcohólicas un proceso convencional (Treyball, 1998). La fermentación de suero de leche tiene un rendimiento teórico máximo de 0,538 g de etanol/g de lactosa; por lo tanto, el producto fermentado contiene aproximadamente entre un 3 y un 5% de etanol, dependiendo de la cepa y de la tecnología de fermentación adoptada, el cual aumentará hasta el 95% (w/w) o 88% (v/v) después de la destilación simple (Zotta et al., 2020).

La purificación de la mezcla agua-etanol ha sido ampliamente estudiada, desde la obtención del fermentado hasta la tecnología aplicada al proceso de destilación. Así, en el estudio realizado por Munk-Angalan et al. (2021) se analiza la composición del fermentado y de las diferentes fracciones en la destilación durante la obtención de etanol a partir de suero de leche fermentado con *Saccharomyces cerevisiae*. Autores como Binous y Mamdouh (2012) evalúan de manera experimental el proceso de destilación mediante los modelos termodinámicos de equilibrio líquido-vapor de Wilson, Van Laar, NRTL y UNIQUAC para determinar el coeficiente de actividad y comparar los resultados con los datos teóricos. Por otra parte, Chuquín (2013) realiza el diseño y la simulación de la columna de destilación para una mezcla de agua-etanol empleando el software Aspen HYSYS.

El presente componente tiene la finalidad de simular la destilación simple del fermentado de suero de leche obtenido con la levadura *Saccharomyces cerevisiae* y previamente purificado para la producción de etanol al 95% w/w, empleando el software simulador de procesos Aspen HYSYS V12.1 con los modelos de equilibrio líquido-vapor NRTL y UNIQUAC modificando principalmente el porcentaje de reflujo.

## **1.1 Objetivo general**

Simular la destilación simple del fermentado de suero de leche previamente purificado para la obtención de etanol.

## **1.2 Objetivos específicos**

1. Definir la composición del fermentado de suero de leche purificado y la configuración apropiada para el sistema de destilación simple.
2. Analizar el equilibrio líquido-vapor durante la destilación simple mediante diferentes modelos termodinámicos.
3. Evaluar la influencia de los parámetros de diseño en el desempeño del sistema de destilación simple.

## **1.3 Alcance**

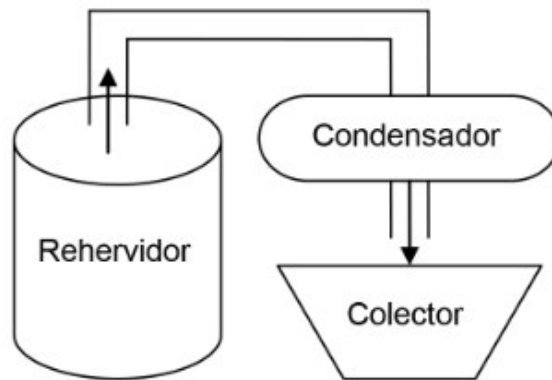
Se realizará un estudio bibliográfico para determinar la línea base referida a la composición del fermentado de suero de leche y configuración apropiada de la columna de destilación simple (incluyendo parámetros del condensador y rehervidor); y a partir de estos parámetros se ejecutará la simulación de arranque empleando el software de procesos Aspen HYSYS V12.1 y Aspen PLUS V12.1 para análisis de equilibrio ternario.

Mediante un análisis de sensibilidad de una sola vía, se modificará el modelo termodinámico para describir el equilibrio líquido-vapor y la relación de reflujo. Se evaluará la influencia de los cambios realizados en el grado alcohólico obtenido, el porcentaje de recuperación y el gasto energético. Finalmente, se realizará un estudio comparativo con los resultados obtenidos y si es posible con valores bibliográficos de estudios con condiciones similares.

## 1.4 Marco teórico

### Destilación Simple

En 1902 Lord Rayleigh estudió la destilación simple también conocida como destilación de una sola etapa o diferencial como un proceso que consta de tres elementos: un condensador, un rehervidor (con dispositivo de calentamiento) y un tanque recolector para el destilado como se esquematiza en la Figura 1.1 (Otiniano, 2012).



**Figura 1.1.** Destilación simple (Otiniano, 2012)

Este método de destilación es empleado en la separación de una mezcla de impurezas no volátiles y un líquido cuyo punto de ebullición sea menor a los 150 °C, o en la separación de dos componentes de una mezcla que tengan una diferencia entre sus puntos de ebullición de 60 a 80 °C. En el caso de mezclas en los que la diferencia entre los puntos de ebullición no exceda los 30 a 60 °C se emplean destilaciones simples en reiteradas ocasiones, es decir, el producto obtenido es vuelto a destilar hasta alcanzar una mayor concentración de este (López, 2017).

Existen dos tipos de destilación simple en función de la presión de operación. La destilación a presión atmosférica que se emplea cuando el punto de ebullición del componente de interés es inferior a la temperatura que produce su descomposición química. La destilación a presión reducida que se utiliza cuando el punto de ebullición del compuesto de interés supera la temperatura a la que ocurre su descomposición química (Angurell, et al., 1999).

### Condensador y Rehervidor

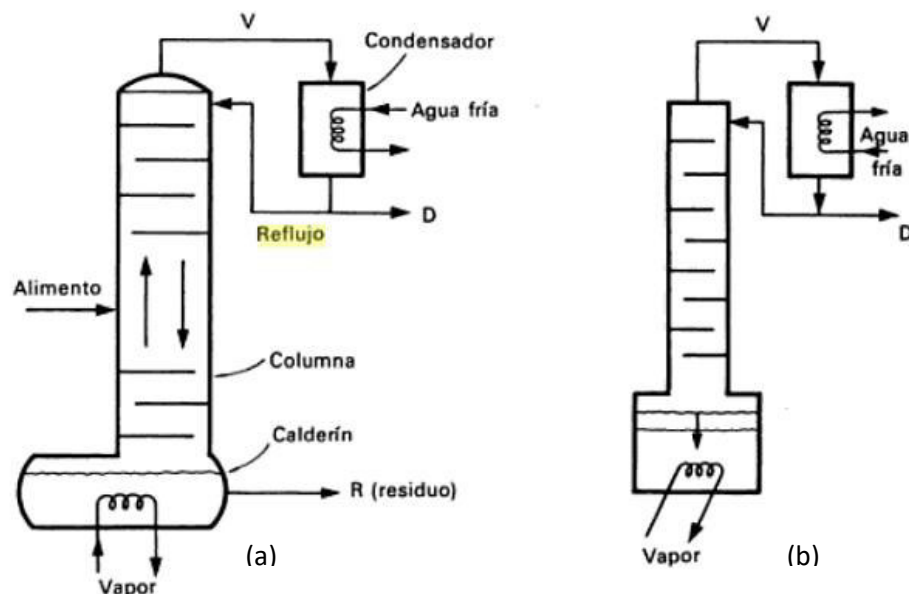
El rehervidor es prácticamente un intercambiador de calor que aporta la energía requerida para calentar los fondos de la torre de destilación con el fin de generar vapor que retorna al proceso de separación. Este equipo puede generar una vaporización completa o parcial

de la corriente de fondos. En forma general, el vapor de agua se emplea como fluido de calentamiento (Valiente, 2013).

El condensador es otro intercambiador de calor latente que en este caso extrae la energía del vapor generado para pasarlo a su estado líquido, esta corriente dependiendo el caso puede salir completamente del sistema como producto destilado o parcialmente y una parte ingresa nuevamente como reflujo (Valiente, 2013). El diseño de ambos equipos, al tratarse de intercambiadores de calor, puede tener diferentes formas y disposiciones espaciales como horizontales o verticales de acuerdo con las necesidades de la columna de destilación o del espacio disponible para la operación.

### Relación de Reflujo

El reflujo se refiere al retorno de una parte de la corriente condensada hacia la columna de destilación y se presenta cuando la rectificación del destilado es requerida como se indica en la Figura 1.2.



**Figura 1.2** (a) Destilación con rectificación continua, (b) Destilación con rectificación discontinua (Costa et al., 2004)

En estas condiciones, el líquido en descenso que reingresa toma íntimo contacto con el vapor en ascenso que se dirige al condensador; en un punto dado no existe equilibrio entre estas dos corrientes, por ello se da una transferencia de materia, en la cual los componentes de mayor volatilidad presentes en el líquido pasan al vapor y aquellos con menor volatilidad pasan del vapor al líquido, con ello la corriente de vapor a medida que asciende alcanza un mayor enriquecimiento de los componentes más volátiles. Es

necesario aclarar que este último método es posible realizarlo tanto en forma continua como discontinua (McCabe et al., 2007; Costa et al., 2004).

### **Volatilidad Relativa**

La volatilidad relativa ( $\alpha_{AB}$ ) es un indicador de la efectividad de la destilación, que tiene relación con la capacidad que tienen los componentes A y B de la mezcla para poder separarse. Matemáticamente está dada por la relación entre los valores de K del componente con mayor volatilidad (menor punto de ebullición) en este caso A y del de menor volatilidad B

$$\alpha_{AB} = \frac{K_A}{K_B}$$

#### **Ecuación 1.1. Volatilidad relativa**

En sistemas cuyo comportamiento es regular  $\alpha_{AB}$  es mayor a 1, mientras que en aquellos sistemas reales cuyo comportamiento es irregular, generalmente por la presencia de azeótropos,  $\alpha_{AB}$  toma valores menores o mayores a 1. En sistemas multicomponentes, la volatilidad relativa se expresa mediante la expresión siguiente (Montoya, 2012).

$$\alpha_{AB} = \frac{y_A (1 - x_A)}{x_A (1 - y_A)}$$

#### **Ecuación 1.2. Volatilidad relativa para sistemas multicomponentes**

### **Modelos Termodinámicos para el Equilibrio Líquido-Vapor**

Existen varios grupos de modelos termodinámicos que describen el equilibrio líquido-vapor en una mezcla, uno de los más empleados es el modelo de ecuación de estado que es óptimo para predecir propiedades de fluidos con una base de hidrocarburos, pero su aplicación es limitada a componentes ligeramente polares y no polares. Otro grupo ampliamente utilizado es el de los modelos de actividad sobre todo cuando se trata de sistemas no ideales con presiones bajas y moderadas. Estos modelos ejecutan cálculos en la fase líquida principalmente además de las relaciones de equilibrio, entre estos se encuentran UNIQUAC y NRTL.

La aplicación y resolución manual de los modelos de actividad resulta compleja por lo que existen software de simulación como Aspen HYSYS que, al ser un simulador fenomenológico, ofrece una amplia gama de modelos termodinámicos a escoger, los cuales emplean diferentes ecuaciones para ajustar mejor la simulación. Además, incorpora

una sección de ayuda donde se muestra las características de cada modelo, la ecuación que emplea y en qué tipo de componentes es más recomendable usarlos (Villalobos, 2020).

Aspen HYSYS es empleado tanto en el ámbito académico como en el industrial para la simulación y diseño de procesos en estado dinámico o estático. Adicionalmente, el software tiene funciones que permiten optimizar las plantas de forma energética y económica, consigue crear diferentes escenarios con el fin de examinar el comportamiento que tiene o tendría la planta, lo que permite entender cómo se desarrolla o funciona un proceso de destilación en la columna (Villalobos, 2020).

### **NRTL (Non-Random-Two-Liquid)**

Del modelo de Wilson parte una extensión que se denomina modelo NRTL, que emplea la teoría de la celda líquida y la mecánica estadística en la representación de la fase líquida. Tiene la capacidad de representar el comportamiento de fase equilibrio líquido-vapor (LLE), equilibrio líquido-líquido (LE) y equilibrio vapor-líquido-líquido (VLLE).

La aplicación del modelo NRTL incluye varios tipos de sistemas químicos y en la alquilación HF con productos químicos no ideales. Incluso al ser consistente termodinámicamente es posible su aplicación en sistemas ternarios y en aquellos de orden superior al utilizar parámetros retrocedidos a partir de datos de equilibrio binario. En el simulador Aspen HYSYS la ecuación tiene 5 parámetros que son ajustables, mismo que son independientes y dependientes de la temperatura. NRTL al contrario de la ecuación de Van Laar, es posible su uso en sistemas diluidos y mezclas de hidrocarburo-alcohol (Aspen HYSYS, 2021).

### **UNIQUAC (UNiversl QUAsi Chemical)**

Este modelo utiliza la teoría cuasiquímica de Guggenheim y la mecánica estadística para representar la fase líquida. Al igual que en el modelo NRTL, este tiene la capacidad de representar el comportamiento de fase equilibrio líquido-vapor (LLE), equilibrio líquido-líquido (LE) y equilibrio vapor-líquido-líquido (VLLE) con una precisión similar al modelo NRTL, con la ventaja de no requerir un factor de no aleatoriedad.

UNIQUAC es más detallada que cualquier otro de los modelos de actividad. Presenta como ventaja una adecuada representación tanto de LLE como de VLE en mezclas de no electrolitos al utilizar únicamente dos parámetros ajustables por binario. Estos parámetros tienen menor dependencia de la temperatura, lo que satisface fines de extrapolación.

Se ajusta a sistemas con moléculas de formas y tamaños variados, como es el caso de soluciones con polímeros. UNIQUAC es aplicable a mezclas que tienen alcoholes, agua, ésteres, hidrocarburos, aldehídos, nitrilos y cetonas (Aspen HYSYS, 2021).

## 2 METODOLOGÍA

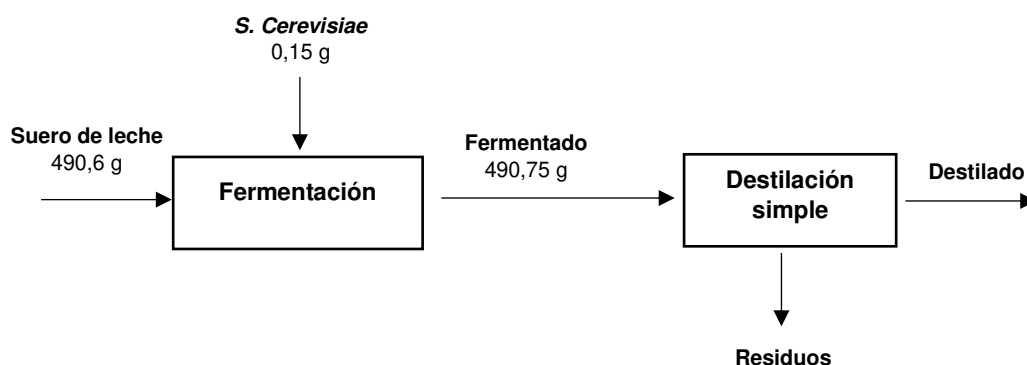
Para la simulación de la destilación simple de etanol obtenido a partir de la fermentación de lactosuero se realizó una investigación con enfoque mixto, es decir, cualitativo y cuantitativo a partir de la cual se describió el fenómeno de equilibrio líquido-vapor y se cuantificó el rendimiento del proceso y el porcentaje de recuperación con base al etanol.

La recopilación de la información base respondió a la búsqueda bibliográfica de artículos científicos, a partir de los cuales, se plantearon balances de masa y se ejecutaron simulaciones en un software especializado en procesos industriales para obtener la composición del destilado de interés.

### 2.1 Definición de la composición del fermentado suero de leche

Se realizó una revisión bibliográfica para determinar la composición del fermentado de suero de leche mediante *Saccharomyces cerevisiae* que ingresará al proceso de destilación simple.

Se analizaron los resultados experimentales obtenidos por Munkh et al. (2021) donde se caracterizan los compuestos volátiles presentes en mayor concentración en bebidas alcohólicas resultantes de un proceso de fermentación de lactosuero. La composición de volátiles incluye alcoholes superiores, ésteres, ácidos y aldehídos, de tal forma que mediante un balance de masa con la información que se muestra en la Figura 2.1 se obtuvo la composición de la corriente de alimentación al proceso de destilación.



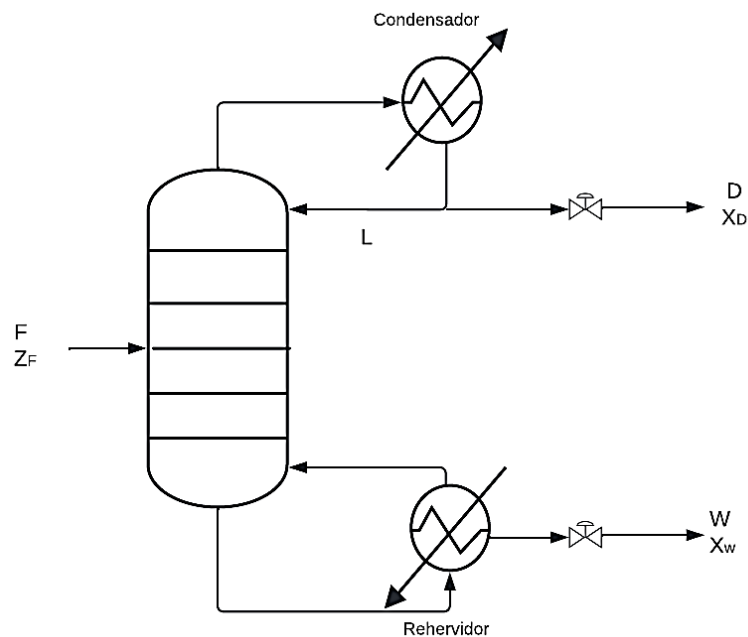
**Figura 2.1.** Datos experimentales para la determinación de la composición de la alimentación

## 2.2 Cálculo del reflujo del sistema

El reflujo del sistema se estimó mediante el enfoque sistemático que se describe a continuación, donde se consideró al sistema como una mezcla binaria de agua-etanol.

### Planteamiento del balance de masa

En la Figura 2.2 se presenta el esquema del sistema de destilación simple analizado y las corrientes respectivas.



**Figura 2.2.** Esquema de la columna de destilación simple

Mediante un balance de masa general y de especies en el sistema global que incluye el condensador y el rehervidor (ecuación 2.1 y 2.2) se calcularon los valores de las corrientes de destilado (D) en los domos y del residuo (W) en los fondos.

El porcentaje másico de etanol en el destilado y en el residuo se asumió igual a 95% y 1% respectivamente, que corresponden a los valores bibliográficos alcanzados en procesos de destilación similares.

$$F = D + W$$

**Ecuación 2.1.** Balance de masa general

$$F * Z_F = D * x_D + W * x_W$$

**Ecuación 2.2.** Balance de etanol



### Elaboración de la curva de equilibrio

En principio se calculó las presiones de vapor de los compuestos de la mezcla binaria etanol (A) – agua (B) a diferentes temperaturas mediante la expresión 2.3 conocida como la ecuación de Antoine. Los límites para el rango de temperatura utilizado corresponden a los puntos de ebullición normal de cada compuesto.

$$\log_{10} P^* = A - \frac{B}{T+C}$$

#### Ecuación 2.3. Ecuación de Antoine

Donde:

$P^*$  = presión de vapor (mmHg)

$A, B, C$  = constantes de Antoine para cada compuesto

$T$  = temperatura (°C)

Una vez obtenidas las presiones de vapor de cada compuesto ( $P^*_A, P^*_B$ ), se determinaron las fracciones molares en el líquido y en el vapor en equilibrio para el compuesto más volátil (A) mediante las ecuaciones 2.4 y 2.5 respectivamente. Dichas expresiones son el resultado de la combinación de la Ley de Raoult y la Ley de Dalton para describir equilibrio líquido – vapor.

$$x_A = \frac{P - P^*_B}{P^*_A - P^*_B}$$

#### Ecuación 2.4. Fracción molar de A en la fase líquida

$$y_A = \frac{x_A * P^*_A}{P}$$

#### Ecuación 2.5. Fracción molar de A en la fase gaseosa

Donde:

$P$  = presión total (760 mmHg)

$x_A$  = fracción molar de la sustancia A en la fase líquida

$y_A$  = fracción molar del compuesto A en la fase vapor

Con las fracciones molares en el equilibrio se estimó la volatilidad relativa ( $\alpha_{AB}$ ) mediante la Ecuación 2.6 y por consiguiente se determinó la abscisa de la curva de equilibrio mediante la Ecuación 2.7.

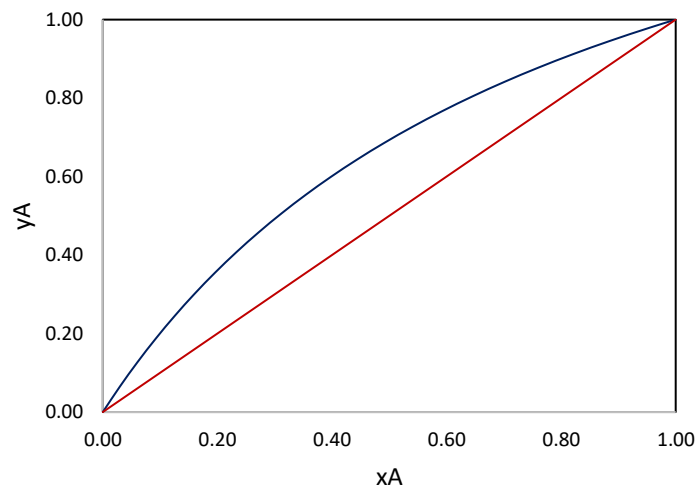
$$\alpha_{AB} = \frac{y_A/x_A}{(1-y_A)/(1-x_A)}$$

**Ecuación 2.6.** Volatilidad relativa

$$y = \frac{\bar{\alpha}_{AB} x_A}{1 + (\bar{\alpha}_{AB} - 1) * x_A}$$

**Ecuación 2.7.** Ecuación curva de equilibrio

Con los pares  $[x \ y]$  se graficó la curva de equilibrio para la mezcla binaria. Para ello, se trazó un eje vertical que representa la fracción molar del vapor del compuesto más volátil y un eje horizontal que representa la fracción molar de la fase líquida del compuesto más volátil; estos ejes fueron del mismo tamaño y se dividieron en partes iguales desde 0 hasta 1. A continuación, se dibujó una recta con pendiente de  $45^\circ$  y se ubicaron los pares de la curva de equilibrio como se muestra en la Figura 2.3.



**Figura 2.3.** Curva de equilibrio líquido-vapor para la mezcla binaria

### Determinación de la recta de alimentación

La recta de alimentación se definió mediante la Ecuación 2.8.

$$Y = \frac{q}{q-1} X - \frac{Z_F}{q-1}$$

**Ecuación 2.8.** Recta de alimentación

Donde:

$q$  = calor necesario para vaporizar un mol de alimentación dividido para el calor latente de vaporización

$Z_F$  = fracción molar del componente más volátil (A) en la corriente de alimentación

El valor de  $q$  se determinó en función de las características de la corriente de alimentación, pues existen cinco formas de alimentar a la columna de destilación y el valor de  $\frac{q}{q-1}$  representa la pendiente de la recta, como se describe en la tabla a continuación.

**Tabla 2.1.** Formas de alimentación a la torre de destilación

Alimentación	Valor de $q$	Observaciones	Pendiente	Forma
Líquido Frío	$q > 1$	$q = 1 + \frac{\overline{C}_p(T_B - T_F)}{\bar{\lambda}}$	$\frac{q}{q-1} > 1$	/
Líquido saturado a $T_B$	$q = 1$		$\frac{q}{q-1} \rightarrow \infty$	
Mezcla Líquido Vapor	$0 < q < 1$	$q$ se refiere al % de líquido en F	$\frac{q}{q-1} < 0$	\
Vapor saturado a $T_R$	$q = 0$		$\frac{q}{q-1} = 0$	—
Vapor sobrecalentado	$q < 0$	$q = -\frac{\overline{C}_{pv}(T_F - T_R)}{\bar{\lambda}}$	$\frac{q}{q-1} > 0$	/

En este caso, al tratarse de un una corriente de alimentación de líquido frío, se calculó el valor de  $q$  mediante la Ecuación 2.9.

$$q = 1 + \frac{\overline{C}_p(T_B - T_F)}{\bar{\lambda}}$$

**Ecuación 2.9.** Estimación del parámetro  $q$

Donde:

$\overline{C}_p$  = capacidad calorífica media

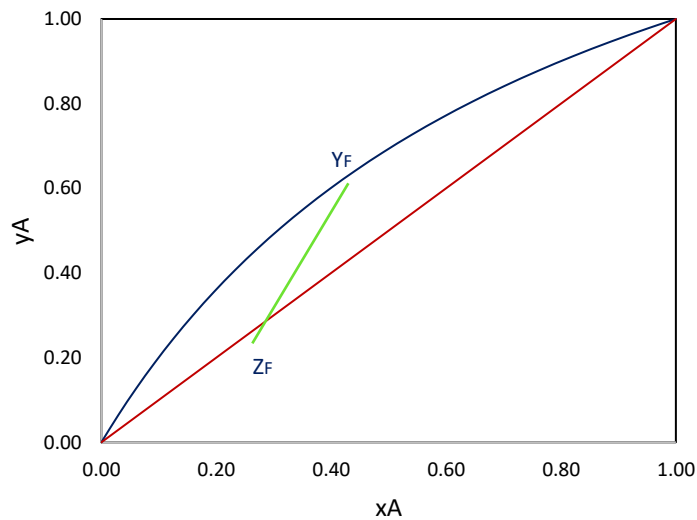
$T_B$  = temperatura de burbuja

$T_F$  = temperatura del fluido frío

$\bar{\lambda}$  = calor latente de vaporización medio

La temperatura de burbuja ( $T_B$ ) se calculó mediante el método de suma de fracciones parciales. Para ello, una vez definida la composición de la mezcla en la fase líquida y las constantes de la ecuación de Antoine, se realizaron iteraciones para estimar la temperatura a la cual la suma de las fracciones molares en la fase de vapor es igual a 1.

Finalmente, para graficar la recta de alimentación se ubicó la fracción molar del compuesto más volátil (A) de la alimentación ( $Z_F$ ) en el eje Y. A continuación, se trazó una recta paralela al eje Y desde  $Z_F$  hasta la recta con pendiente de  $45^\circ$  y desde este punto se graficó la recta de alimentación con la pendiente  $\frac{q}{q-1}$  hasta que se cruce con la curva de equilibrio para definir el punto  $y_F$ , como se muestra en la Figura 2.4.



**Figura 2.4.** Recta de alimentación en la curva de equilibrio

### Cálculo del reflujo

Con el valor de  $y_F$  se procedió a calcular el valor del reflujo mínimo ( $R_{min}$ ) a través de la Ecuación 2.10 y por consiguiente el reflujo de operación ( $R_{op}$ ) mediante la relación que se indica en la Ecuación 2.11.

$$R_{min} = \frac{x_D - Y_F}{y_F - Z_F}$$

**Ecuación 2.10.** Reflujo mínimo

$$R_{op} = 1.5 * R_{min}$$

**Ecuación 2.11.** Reflujo de operación

## 2.3 Definición de la configuración del sistema de destilación

La configuración apropiada del sistema de destilación a simular se definió mediante la aplicación del método gráfico de McCabe Thiele como se describe a continuación. La configuración incluye la determinación del número de platos teóricos en la columna de destilación simple y el plato de alimentación.

### Determinación de la recta de operación en la zona de enriquecimiento (ROE)

Para definir la recta ROE se plantearon balances de masa general y de especies en la zona de enriquecimiento (platos ubicados corriente arriba de la alimentación o domos).

$$\bar{V}_{n+1} = \bar{L}_n + D$$

**Ecuación 2.12.** Balance general zona de enriquecimiento

$$\bar{V}_{n+1} y_{n+1} = \bar{L}_n x_n + D x_D$$

**Ecuación 2.13.** Balance de especies zona de enriquecimiento

Además, con la relación de reflujo que está dada por  $L/D$  y al reemplazar en la expresión 2.13 se obtiene la expresión para el cálculo de la recta ROE.

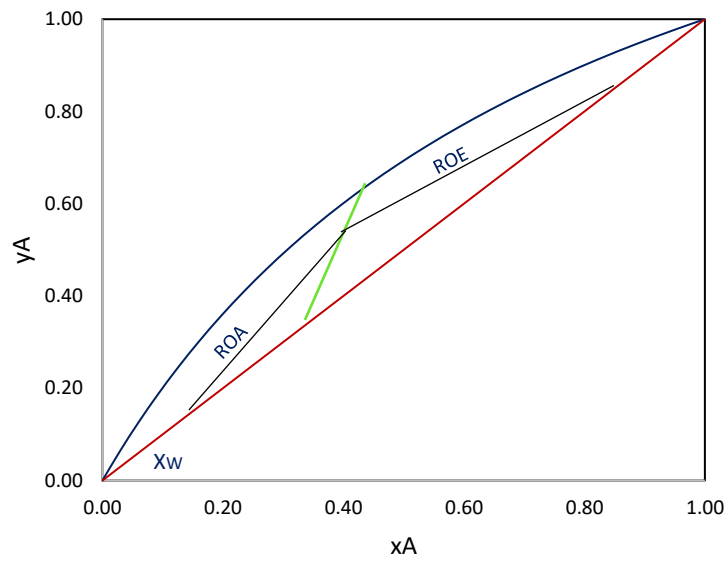
$$y = \frac{R}{R+1} x + \frac{x_D}{R+1}$$

**Ecuación 2.14.** Recta de operación en la zona de enriquecimiento

Para graficar la recta ROE se ubicó la fracción molar del componente más volátil (A) del destilado  $x_D$  en el eje X. A continuación, se trazó una recta paralela al eje Y desde  $x_D$  hasta la recta con pendiente de  $45^\circ$  y se trazó la recta ROE desde este punto hasta que cruce con la recta de alimentación, como se muestra en la Figura 2.6.

### Determinación de la recta de operación en la zona de agotamiento (ROA)

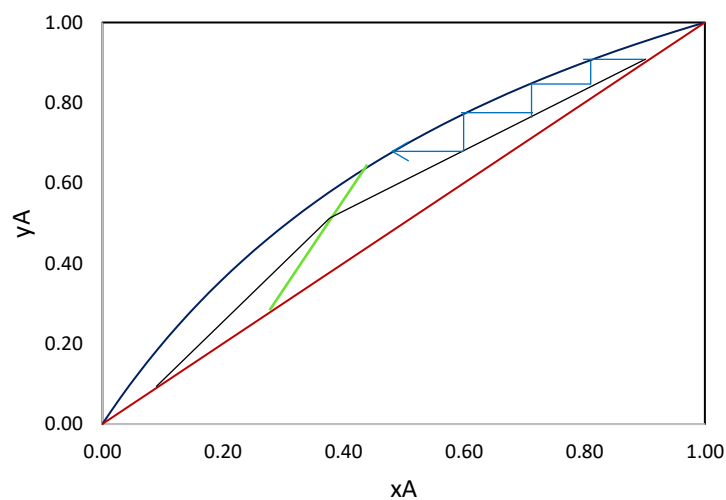
Para la recta ROA se ubicó la fracción molar del compuesto más volátil (A) del residuo,  $x_W$  en el eje X, a continuación, se graficó una recta paralela al eje Y desde  $x_W$  hasta la recta con pendiente de  $45^\circ$  y desde este punto se trazó una recta hasta el punto de intersección entre la recta ROE y la recta de alimentación, como se muestra en la Figura 2.6.



**Figura 2.6.** Rectas de operación en las zonas de enriquecimiento y de agotamiento

### Determinación del número de platos y plato de alimentación

Se procedió a graficar rectas paralelas y perpendiculares al eje x para determinar el número de platos teóricos como se muestra en la figura a continuación.



**Figura 2.7.** Método gráfico McCabe Thiele

El punto inicial del trazado de los platos teóricos fue la intersección de la ROE con la línea con pendiente de 45°, punto desde el cual se dibujó una paralela al eje X hasta la curva de

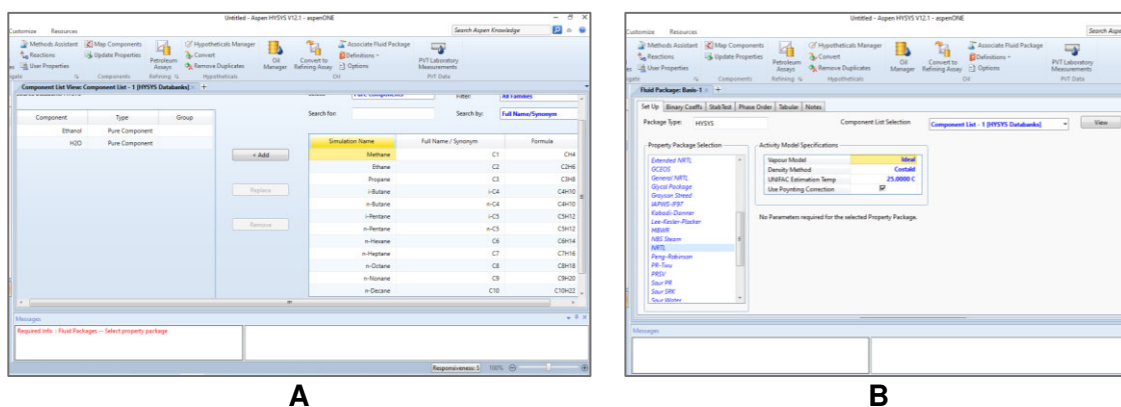
equilibrio. Desde el último punto se trazó una perpendicular hasta que se cruce con la ROE. Se continuó con este procedimiento de trazado en forma de escalones por todo el espacio disponible entre la curva de equilibrio y las rectas ROE y ROA. El trazado concluyó cuando se alcanzó el punto final de la ROA. El número de escalones resultantes constituye el número de platos teóricos. El plato de alimentación corresponde al escalón que cruce con la recta de alimentación.

La configuración del sistema de destilación simple apropiado se definió con base en la curva de equilibrio obtenida con la Ley de Raoult y las curvas de equilibrio elaboradas con los modelos termodinámicos NRTL y UNIQUAC. Para estos últimos, se ingresaron los datos de la composición del fermentado de lactosuero y las condiciones de operación al software simulador de procesos Aspen HYSYS V12.1. Se extrajeron los pares  $[x \ y]$  que corresponden a las fracciones molares del equilibrio líquido – vapor y se aplicó el método de McCabe Thiele descrito anteriormente.

## 2.4 Simulación en Aspen HYSYS V12.1

Los datos referidos a composición de la alimentación, condiciones de operación y configuración de la columna de destilación conformaron la línea base del proceso de destilación simple y se ingresaron al software Aspen HYSYS V12.1 para la simulación en la unidad de procesos T-100 como se detalla a continuación.

1. En la pestaña de nuevo caso (A) se ingresaron todos los componentes de la corriente de alimentación. Se seleccionó el paquete termodinámico NRTL o UNIQUAC según corresponda al análisis requerido (B).



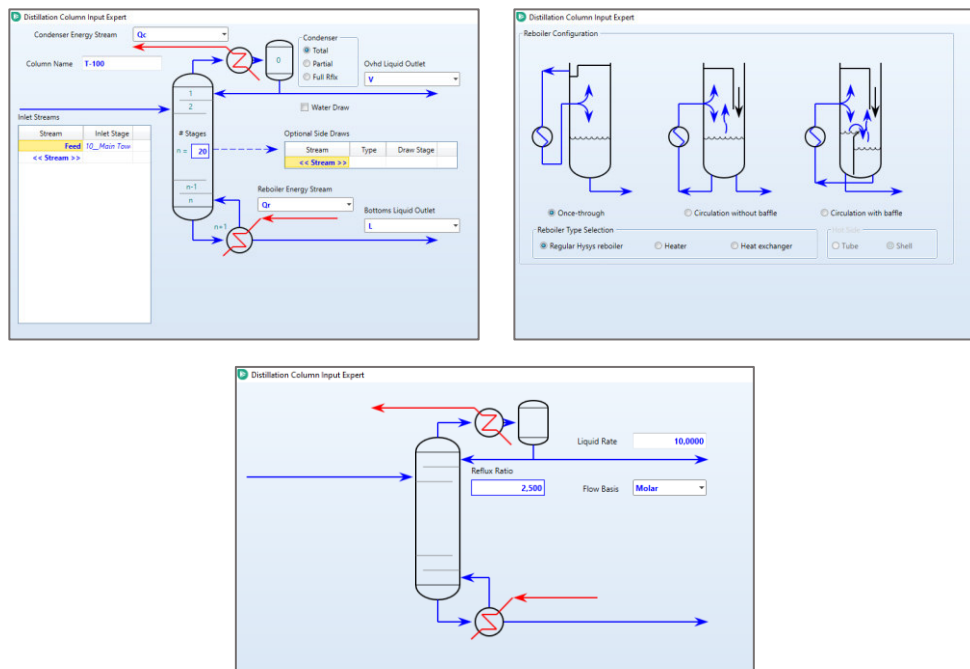
**Figura 2.8.** Ingreso de componentes y selección de paquetes termodinámicos en Aspen HYSYS V12.1

- En el ambiente de simulación (Figura 2.9) se seleccionó una corriente de entrada y se ingresó los datos de la corriente de entrada y la composición que incluye alcoholes superiores, ésteres, ácidos y aldehídos.

Stream Name	Feed	Aqueous Phase
Vapour / Phase Fraction	0.0000	1.0000
Properties		
Temperature (C)	36.00	36.00
Pressure (kPa)	101.3	101.3
Molar Flow (kgmole/h)	100.0	100.0
Mass Flow (kg/h)	2082	2082
Std Ideal Gas Vol Flow (m <sup>3</sup> /h)	2.203	2.203
Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-2.833e+005	-2.833e+005
Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	13.44	13.44
Heat Flow (kW)	-2.833e+007	-2.833e+007
Liq Vol Flow @Std Cond (m <sup>3</sup> /h)	2.112	2.112
Fluid Package	Disto-1	
Utility Type		

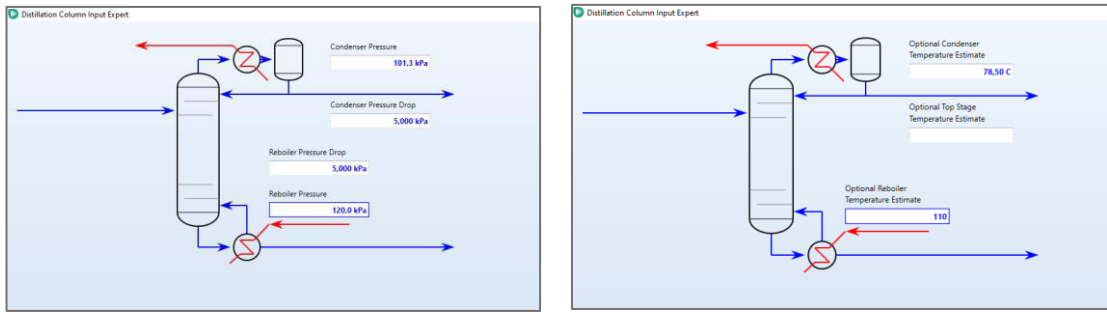
**Figura 2.9.** Registro de condiciones de corriente de alimentación

- Se eligió la columna de destilación T-100 que cuenta con un condensador y un rehervidor y se completó los datos de número de platos, nombres de corrientes y relación de reflujo como se indica en la Figura 2.10. Se ingresaron también los datos de presión y temperatura solicitados para condensador y rehervidor que se muestran en la Figura 2.11.



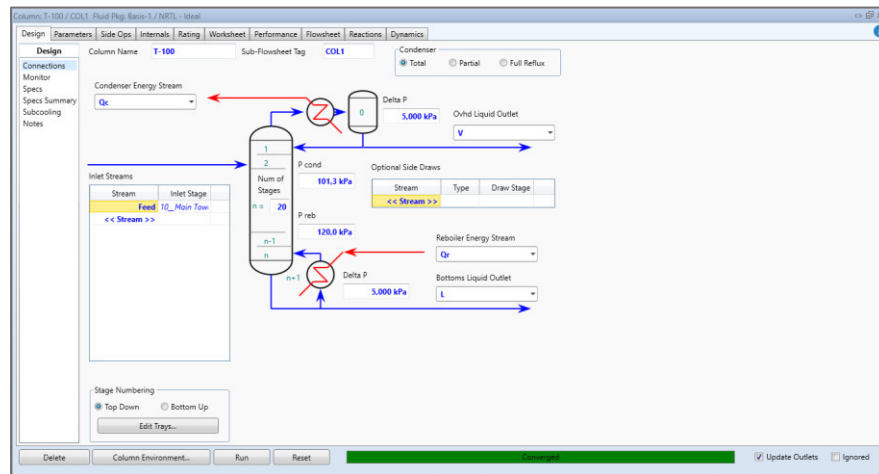
**Figura 2.10.** Parámetros de simulación para la columna de destilación en Aspen HYSYS V12.1





**Figura 2.11.** Parámetros de simulación para el condensador y rehervidor en Aspen HYSYS V12.1

- Finalmente, se corre la simulación hasta que cambie de estado a “converge” como se indica en la figura siguiente.



**Figura 2.12.** Convergencia de la simulación en Aspen HYSYS V12.1

### 3 RESULTADOS, CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

#### 3.1 Resultados

##### Composición del fermentado

La composición porcentual en masa y fracción molar del fermentado de lactosuero se presenta en la Tabla 3.1. De acuerdo con el proceso de fermentación, la alimentación ingresará a la columna de destilación simple a 36 °C y 101,325 kPa a razón de 100 kmol/h.

**Tabla 3.1.** Composición del fermentado de lactosuero purificado

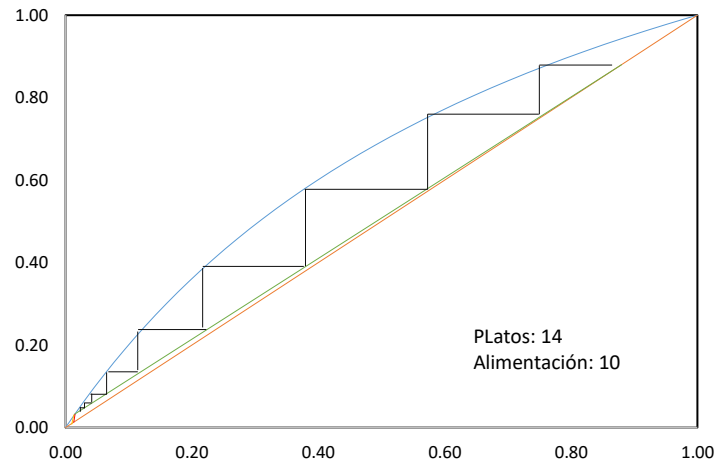
Tipo de compuesto volátil	Nombre del compuesto	Fórmula	Punto de ebullición normal (°C)	Porcentaje en masa	Fracción molar
Aldehído	Acetaldehído	CH <sub>3</sub> CHO	20,5	0,026	0,000110
Éster	Acetato de etilo	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	77,0	0,019	0,000040
Alcohol	2-butanol	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> O	99,5	0,015	0,000038
	1-propanol	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> O	97,0	0,050	0,000154
	1-butanol	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> O	117,7	0,003	0,000007
	2-metil-1-propanol	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> O	108,0	0,089	0,000221
	2-metil-1-butanol	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> O	128,0	0,038	0,000080
	3-metil-1-butanol	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> O	132,0	0,201	0,000419
	Etanol	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	78,5	2,883	0,011522
Ácido	Ácido acético	CH <sub>3</sub> COOH	118,0	0,007	0,000020
Otros	Agua	H <sub>2</sub> O	100,0	96,669	0,987390

Se evidencia que la fermentación del lactosuero genera varios subproductos además de etanol que incluyen principalmente alcoholes superiores, aldehídos, ésteres y ácido acético. De acuerdo con la composición establecida, la fermentación alcohólica del lactosuero con *Saccharomyces cerevisiae* presenta un rendimiento de 2,9% de etanol, lo cual concuerda con el rendimiento teórico entre 3% y 5% definido por Zotta et al. (2020) que depende de la cepa de levadura empleada y de la tecnología de fermentación adoptada.

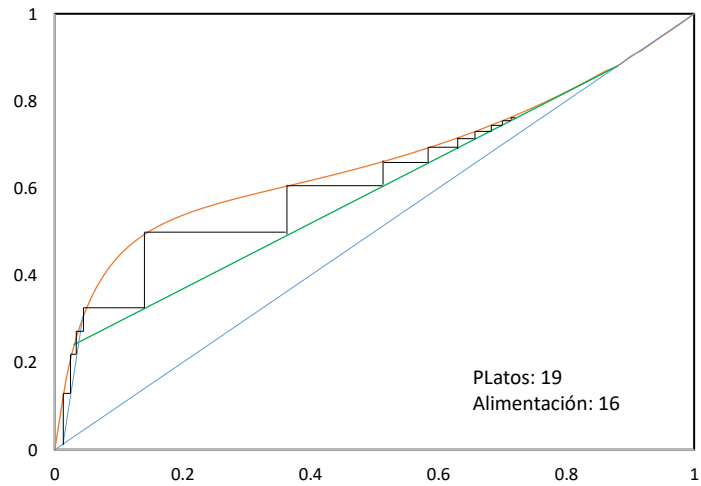
Con referencia a los puntos de ebullición normal presentados en la Tabla 3.1 se espera como productos en la corriente de destilado el acetato de etilo y el acetaldehído además del etanol que es el producto de interés, pues exhiben puntos de ebullición menores al del etanol (78,5°C).

### Configuración del sistema de destilación

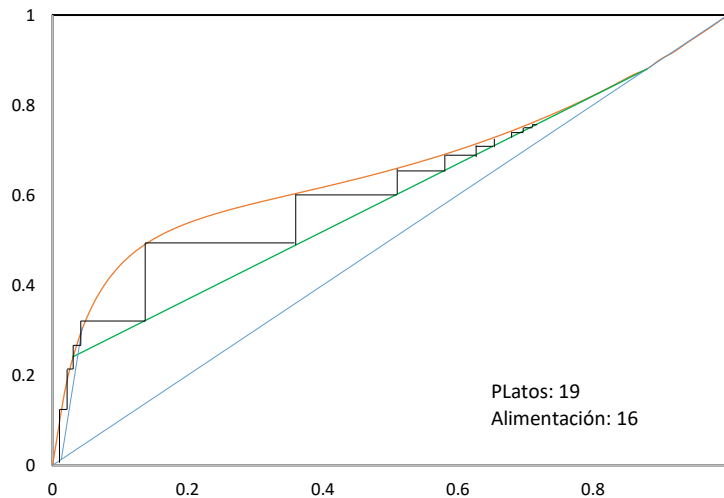
En las Figuras 3.1 a 3.3 se presentan las curvas de equilibrio líquido – vapor, así como los resultados al aplicar el método de McCabe Thiele con los modelos termodinámicos Ley de Raoult, NRTL y UNIQUAC respectivamente.



**Figura 3.1.** Equilibrio líquido-vapor para etanol-agua con la Ley de Raoult



**Figura 3.2.** Equilibrio líquido-vapor para etanol-agua con el modelo NRTL



**Figura 3.3.** Equilibrio líquido-vapor para etanol-agua con el modelo UNIQUAC

La curva de equilibrio lograda al combinar la Ley de Raoult y la Ley de Dalton difiere significativamente de aquellas obtenidas con los modelos NRTL y UNIQUAC debido a la presencia de los coeficientes de actividad. Es evidente que la incorporación de dichos coeficientes en la fase líquida para la mezcla etanol – agua permite describir el comportamiento real durante el equilibrio líquido – vapor pues se manifiesta el azeótropo característico en la fracción molar del 88% (95% en fracción másica). Los coeficientes de actividad describen el grado de divergencia del comportamiento de una sustancia con respecto al comportamiento ideal de la mezcla y se calculan a partir de las interacciones entre moléculas, grupos funcionales y superficies de contacto.

Aunque la aplicación de la Ley de Raoult combinada con la Ley de Dalton para trazar la curva de equilibrio es más sencilla, promueve una configuración del sistema de destilación incorrecta ya que asume un coeficiente de actividad de 1, es decir, que se trata de una mezcla ideal. Coleman (2021) afirma que, en general, para determinar los requisitos de diseño de una columna de destilación, el uso de la Ley de Raoult y la Ley de Dalton reducirá el número de platos necesarios para hacer una separación o en su defecto para el mismo número de platos, subdimensionará el reflujo requerido. Esta tendencia se verifica con el número de etapas determinadas con los diferentes modelos termodinámicos.

Por otra parte, al superponer las curvas de equilibrio obtenidas con los modelos NRTL y UNIQUAC no presentan diferencias significativas entre ellas, razón por la cual reflejan el mismo número de platos teóricos y plato de alimentación. Esto se debe a que la forma de

estimar los coeficientes de actividades es similar. En la Tabla 3.2 se presenta el resumen de la configuración del sistema de destilación obtenido en cada caso.

**Tabla 3.2.** Configuración del sistema de destilación simple

Componente	Caso 1 (Ley de Raoult)	Caso 2 (NRTL y UNIQUAC)
<i>Torre de Destilación</i>		
Número de platos	14	19
Plato Alimentación	10	16
Presión (kPa)	101,325	101,325
Temperatura (°C)	78,5	78,5
<i>Condensador</i>		
Temperatura (°C)	78,5	78,5
Presión (kPa)	101,325	101,325
<i>Rehervidor</i>		
Temperatura (°C)	102,95	102,95
Presión (kPa)	121,59	121,59
Configuración	Sin deflector	Sin deflector

Los valores de presión y temperatura del rehervidor empleados para la simulación se obtuvieron de bibliografía y corresponden a los del estudio de destilación convencional de etanol (Chuquín, 2013).

### Efecto del reflujo

La relación de reflujo cambia para la curva de equilibrio calculada con la Ley de Raoult en comparación con aquellas curvas obtenidas con NRTL y UNIQUAC debido a que su estimación está asociada con la fracción molar de etanol en el vapor de la alimentación ( $y_F$ ) que es el punto de intersección de la recta de alimentación con la curva de equilibrio. Así, se determinó una relación de reflujo de 46,67 y de 3,03 para los casos 1 y 2 respectivamente.

La pureza del producto destilado, el porcentaje de recuperación de etanol y el gasto energético se ven directamente influenciados por la relación de reflujo y la configuración del sistema de destilación que se emplea en la simulación.

### Pureza del producto

En la Tabla 3.3 se presenta la composición en porcentaje másico para las corrientes de destilado y residuo alcanzadas en las simulaciones con la relación de reflujo y la configuración del sistema de destilación definidas para los casos 1 y 2.

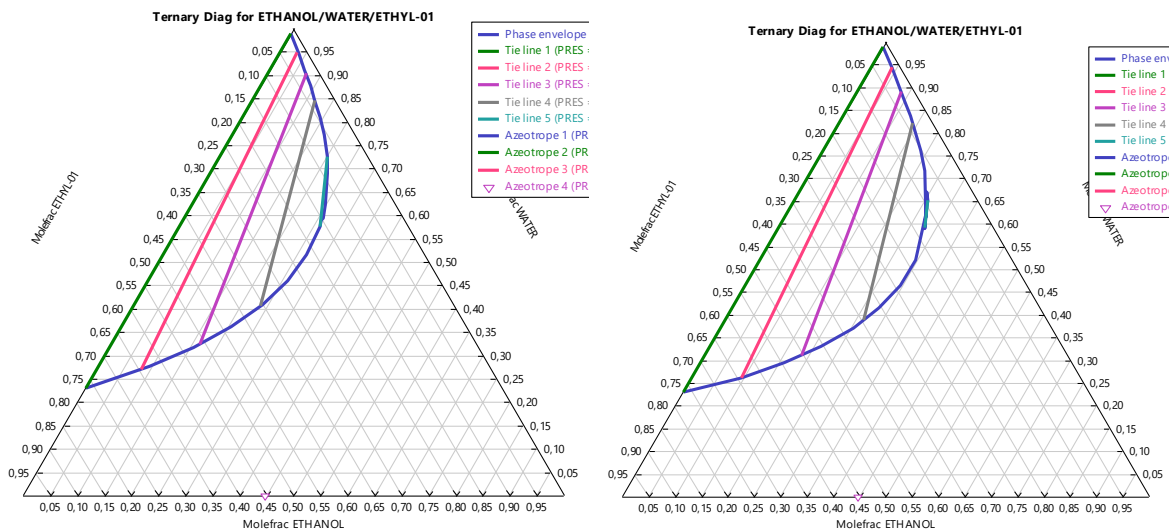
**Tabla 3.3.** Composición en porcentaje másico del destilado (D) y residuo (R)

	Caso 1				Caso 2			
	NRTL		UNIQUAC		NRTL		UNIQUAC	
	D	R	D	R	D	R	D	R
Acetaldehído	0,0	0,0	3,4	0,0	0,0	0,0	3,6	0,0
Acetato de etilo	2,4	0,0	2,4	0,0	2,6	0,0	2,6	0,0
2-butanol	0,0	0,0	0,0	0,0	1,3	0,0	1,4	0,0
1-propanol	0,1	0,1	0,1	0,0	3,8	0,0	3,4	0,0
1-butanol	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,1	0,0
2-metil-1-propanol	0,1	0,1	0,1	0,1	8,7	0,0	7,5	0,0
2-metil-1-butanol	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-metil-1-butanol	0,0	0,2	0,0	0,2	0,0	0,2	0,0	0,2
Etanol	90,4	2,2	86,9	2,2	66,8	2,4	65,9	2,4
Ácido acético	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Agua	7,0	97,4	7,1	97,4	16,7	97,2	15,5	97,3

La pureza del destilado tanto en el caso 1 como en el caso 2 es menor cuando se realiza la simulación con el modelo termodinámico UNIQUAC que cuando se usa el modelo NRTL.

Este comportamiento se debe a que la determinación de los coeficientes de actividad en el modelo UNIQUAC se compone de dos partes. La primera considera las diferencias de tamaño y forma molecular en una mezcla (combinatoria), y la segunda toma en cuenta las interacciones energéticas y los tamaños de los grupos funcionales y las superficies de interacción (residual), siendo la segunda la responsable de la interacción del etanol con el acetaldehído ocasionando su presencia en el destilado y, por lo tanto, la pureza disminuye.

Además del agua, la pureza del producto final se ve afectada por la presencia de acetato de etilo y acetaldehído cuyos puntos de ebullición son menores al del etanol. Al analizar el equilibrio ternario con etanol, agua y acetato de etilo que se indica en la Figura 3.4, se observa que, dada la composición de la corriente de alimentación, el acetato de etilo formará parte de la corriente de salida sin importar el modelo termodinámico usado ya que no existe diferencia entre las curvas binodales de los modelos NRTL y UNIQUAC.



**Figura 3.4.** Diagramas de equilibrio ternario obtenidos con NRTL y UNIQUAC

Por otra parte, cuando el reflujo disminuye de 46,67 a 3,03, la pureza del producto se reduce un 26,1% con el modelo NRTL y un 24,2% al emplear el modelo UNIQUAC. Esta tendencia responde a que el reflujo actúa como un plato teórico, de manera que su aumento promueve el incremento de la concentración de etanol en el destilado. De hecho, una disminución en la eficiencia de un plato con respecto a la etapa teórica puede compensarse a través del aumento de reflujo (Al-yaqoobi et al, 2016; Eldirderi, 2014; Chuquín, 2013).

En los dos escenarios analizados, el modelo NRTL resulta ser el más apropiado para describir la purificación del fermentado de lactosuero mediante destilación simple. Estos resultados concuerdan con los reportados por Faúndez y Valderrama (2009) que determinaron que la concentración de etanol en la fase gaseosa luego de una destilación alcohólica simple presenta una desviación absoluta del 24% con el modelo NRTL y del 30% con UNIQUAC respecto a valores experimentales.

La precisión del modelo NRTL para describir el equilibrio líquido-vapor cuando etanol, agua y congéneres están presentes en una mezcla responde a la consideración de no linealidad de la fase líquida mientras supone idealidad en la fase de vapor (Faúndez y Valderrama, 2009).

### **Porcentaje de recuperación**

En la Tabla 3.4 se presenta el porcentaje de recuperación para cada compuesto presente en la corriente de destilado. La recuperación se estimó como la relación entre el compuesto puro obtenido en los domos y el compuesto puro en la alimentación.

**Tabla 3.4.** Porcentaje de recuperación en el destilado

	Caso 1		Caso 2	
	NRTL	UNIQUAC	NRTL	UNIQUAC
Acetaldehído	0,0	100,0	0,0	99,5
Acetato de etilo	99,9	100,0	99,9	99,9
2-butanol	0,3	0,8	61,7	66,0
1-propanol	1,4	2,3	54,6	48,9
1-butanol	0,0	0,0	8,9	16,6
2-metil-1-propanol	0,8	1,0	70,6	61,5
2-metil-1-butanol	0,0	0,0	0,0	0,0
3-metil-1-butanol	0,0	0,0	0,0	0,0
Etanol	24,7	23,7	16,7	16,6
Ácido acético	0,0	0,0	0,0	0,0
Agua	0,1	0,1	0,1	0,1

Mientras el porcentaje de recuperación del acetato de etilo que es un compuesto de similar volatilidad que el etanol es 100%, en el caso del etanol no supera el 25% tanto para el modelo NRTL como el UNIQUAC debido a la formación de azeótropo con el agua y a la baja concentración en la alimentación como resultado del bajo rendimiento de etanol en la fermentación de lactosuero.

Estos resultados indican que si se alimenta una corriente que contiene 100 kg/h de etanol a la columna de destilación solo se podrá recuperar 25 kg/h antes de alcanzar el azeótropo con el agua. Por lo tanto, se evidencia la necesidad de varias etapas de destilación simple que permitan alcanzar porcentajes de recuperación globales favorables.

Asimismo, el aumento de reflujo incrementa la recuperación en un 8,0% con el modelo NRTL y en 7,1% con el modelo UNIQUAC, debido a que la cantidad de líquido rico en los componentes más volátiles se recicla en la columna, generando mayor contacto entre el vapor y el líquido. Bajo esta premisa, el número de bandejas necesario es mínimo en el caso de que una columna de destilación funcione en condiciones de reflujo total, que es el presente caso (Shafeek et al., 2010).

Por el contrario, la disminución de reflujo aumenta el porcentaje de recuperación de alcoholes superiores debido a que la disminución de la relación de reflujo aumenta el requerimiento de platos teóricos. Una columna de destilación con mayor cantidad de etapas teóricas facilitará la separación de etanol del resto de alcoholes superiores. Dado que los modelos NRTL y UNIQUAC se basan no sólo en puntos de ebullición, sino también en las actividades, cuando el etanol se separa a la fase vapor, la actividad de la fase líquida



incrementará pues en el caso de UNIQUAC se toma en cuenta las interacciones entre grupos funcionales y tamaños de moléculas y NRTL asume idealidad en la fase de vapor; esto favorecerá la separación de alcoholes superiores.

### **Consumo energético neto**

En la Tabla 3.5 se presenta el consumo energético neto alcanzado en las simulaciones para diferentes relaciones de reflujo y configuración del sistema de destilación.

**Tabla 3.5** Consumo energético neto

	Caso 1		Caso 2	
	NRTL	UNIQUAC	NRTL	UNIQUAC
<b>Condensador (kW)</b>	-178,73	-176,41	-15,50	-15,27
<b>Rehervidor (kW)</b>	320,57	318,06	157,38	156,53
<b>Neto (kW)</b>	499,30	494,47	172,88	171,80

Aunque el incremento en la relación de reflujo genera un mayor gasto energético, también aumenta el porcentaje de recuperación y la pureza del destilado que es el objetivo fundamental de la destilación.

Se observa además que, en los dos casos, el modelo NRTL presenta un mayor gasto energético frente al modelo UNIQUAC, lo cual está relacionado con el porcentaje de pureza obtenido en el destilado. Así, para el caso 1, con 4,83 kW extras que se emplea en el método NRTL se logra un 3,5% más de pureza y 1,0% más de recuperación mientras que en el caso 2 con 1,08 kW adicionales que se emplea en el modelo NRTL, se obtiene un destilado 0,9% más puro y con 0,1% más de recuperación. Este comportamiento concuerda con lo expresado por Chuquín (2015), quien afirma que cuando el reflujo disminuye, también disminuye la energía requerida en el condensador y en el rehervidor.

El signo del calor neto resulta positivo en todos los escenarios, es decir, se requiere entregar mayor cantidad de energía para el rehervidor que la cantidad de energía que se retira en condensador. Esto se debe a la baja temperatura de la corriente de alimentación (36°C), que permite catalogar a la misma como un líquido frío al que se debe calentar hasta llevar al punto de ebullición del componente de interés para lograr su separación de la mezcla. En consecuencia, no es posible realizar una integración energética, que según Cortés et al. (2016) es un proceso que busca incrementar la eficiencia global de la producción de alcohol a nivel técnico y económico mediante la reutilización de la energía disponible de otras corrientes del mismo proceso.

## 3.2 Conclusiones

El fermentado de suero de leche obtenido mediante la lavadura *Saccharomyces cerevisiae* contiene principalmente agua (96,7%), etanol (2,9%) y volátiles (0,4%), esta mezcla se ingresó a la columna de destilación como un fluido frío a 36 °C y 101.325 kPa.

Se establecieron dos escenarios factibles para la simulación de la columna de destilación simple en función del modelo de equilibrio que se emplea. El primer escenario con una relación de reflujo de 46,67, 14 platos teóricos y alimentación en el plato 10, y el segundo con una relación de reflujo de 3,03, 19 platos teóricos y alimentación en el plato 16.

Las curvas de equilibrio líquido – vapor difieren significativamente al comparar los modelos NRTL y UNIQUAC con el modelo de la Ley de Raoult. Esto debido a que la ley de Raoult asume idealidad, es decir un coeficiente de actividad igual a 1, mientras que NRTL y UNIQUAC calculan los coeficientes de actividad atendiendo a las interacciones entre moléculas.

Se estableció que, para un flujo de alimentación de 100 kmol/h y las condiciones de los dos escenarios definidas, un aumento en la relación de reflujo incrementa el porcentaje de pureza del destilado y el porcentaje de recuperación, así también, esto implica un incremento significativo en el calor neto requerido del sistema de destilación.

Para los dos escenarios evaluados, se establece que el modelo NRTL es el más idóneo para describir el comportamiento de la destilación simple del fermentado de lactosuero, ya que la pureza del producto y el porcentaje de recuperación son similares a aquellos obtenidos experimentalmente.

## 3.3 Recomendaciones

Para obtener un destilado de mayor pureza (cercana al azeótropo) se recomienda realizar el análisis con un fermentado de suero de leche enriquecido o con el fermentado de otro producto, como el fermentado de caña y comparar el porcentaje de recuperación y el rendimiento. Además, se recomienda realizar un análisis de costos para determinar si el proceso es rentable y se lo puede escalar a una planta piloto.

## 4 REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Al-yaqoobi, Atheer; Hogg, David; Zimmerman, William B. (2016). Microbubble Distillation for Ethanol-Water Separation. *International Journal of Chemical Engineering*, 2016(), 1–10. doi:10.1155/2016/5210865
- Angurell, I., et al. (1999). Operaciones básicas en el laboratorio de química. Universidad de barcelona. Recuperado de: <http://www.ub.edu/oblq/oblq%20castellano/index1.html#>. (febrero, 2022)
- Aspen HYSYS (V12.1). (2021). England, Bedford: Aspen Technology Inc.
- Costa, J., et al. (2004). Curso de Ingeniería Química. Introducción a los procesos, las operaciones unitarias y los fenómenos de transporte. Barcelona: Reverté, S.A.
- Coleman, L. (2021). Liquid activity coefficients. Recuperado de: [https://eng.libretexts.org/Bookshelves/Chemical\\_Engineering/Distillation\\_Science\\_\(Coleman\)/07%3A\\_Binary\\_Interaction\\_Parameters](https://eng.libretexts.org/Bookshelves/Chemical_Engineering/Distillation_Science_(Coleman)/07%3A_Binary_Interaction_Parameters) (febrero, 2022)
- Cortés, M., (2016). Energetic analysis and process integration in alcohol distillation: conventional and double effect method, *Centro Azúcar*, 43(2), 49-65
- Chuquín, D. (2013). Diseño y simulación de una columna de destilación binaria de etanol-agua para la empresa HETWEEN. Tesis de grado previa a la obtención del título de: Ingeniero Químico.
- Eldierderi, M. (2014). The Separation of a Binary Water/Ethanol Solution via a Continuous Feed Distillation Column as a function of Feed Stage Location and Reflux Ratio. *International Journal of Science and Research*, ISSN (Online): 2319-7064
- Faúndez, C., Valderrama, L. (2009). *Activity Coefficient Models to Describe Vapor-Liquid Equilibrium in Ternary Hydro-Alcoholic Solutions*. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 17(2) 259-267
- Gantumur, M.-A., Sukhbaatar, N., Qayum, A., Bilawal, A., Tsembeltsogt, B., Oh, K.-C., . . . 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.
- Housam Binous; Mamdouh A. Al-Harhi (2012). Simple batch distillation of a binary mixture. *Computer Applications in Engineering Education*. doi:10.1002/cae.21556

- Lang, P., Yatim, H., & Moszkowicz, P. y. (1994). Batch Extractive Distillation under constant reflux ratio. *Computers & chemical engineering*, 18(11/12), 1057-1069.
- Lauzurique, Y., Zumalacárregui, L., Pérez, O., & Curbelo, A. (2016). Simulación de la destilación extractiva para la obtención de etanol anhidro empleando glicoles. *Ciencia, Docencia y Tecnología*, 27(53), 362-383.
- Lombina, J., & Otiniano, M. (1998). Antecedentes y perspectivas de la operación de destilación discontinua. *Per Quim*, 1(1), 53-65.
- López, M. (2017). Operaciones para la gestión de residuos industriales. Madrid: CEP S.L.
- McCabe, W., Smith, J. & Harriot, P. (2007). Operaciones unitarias en ingeniería química (7.ma ed.). México: McGraw-Hill Interamericana.
- Montoya, A. (2012). "diseño de una columna de destilación para recuperación de una sustancia termosensible". Proyecto para optar al Título de Ingeniero Civil Químico. Pontificia Universidad Católica de Valparaíso.
- Otiniano, M. (2012). Simulación del comportamiento de una mezcla de multicomponentes en la destilación discontinua simple. *Revista Peruana de Química e Ingeniería Química*, 15(2), 49–55.
- Perry Robert H., Green Don W. y Maloney James O. (2001). Manual del Ingeniero Químico (6ta ed.). México: Mc Graw-Hill.
- Shafeeq, Amir; Daood, Syed Sheraz; Muhammad, Ayyaz; Ijaz, Aamir (2010). *Effect of variable reflux ratio on binary distillation in a laboratory scale distillation column*, 35–38.doi:10.1109/icbee.2010.5650925
- Smith, J., Van Ness, H. & Abbott, M. (2003). Termodinámica en Ingeniería Química, (6ta ed.). McGraw-Hill.
- Villalobos, A. (2020). Simulación y control avanzado de una columna de destilación. Trabajo final en la obtención de Máster Universitario en Ingeniería Industrial. Universidad de Sevilla
- Vogelpohl, A. (2021). *Distillation* (2.<sup>a</sup> ed.). Germany: De Gruyter
- Uyazán, Uyazán, A., Gíl, I., Aguilar, J., Rodríguez, G., & Caicedo, L. (2006). Producción de alcohol carburante por destilación extractiva: Simulación del proceso con glicerol. *Revista Ingeniería e Investigación*, 26(1), 45-50.

- Yatim, H., Moszkowicz, P., & Otterbein, M. y. (1993). Dynamic Simulation of Bach Extractive Distillation process. *Computers & chemical engineering*, 17(1), S57-S62.
- Zotta, T., Solieri, L., Lacumin, L., Picozzi, C., & 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 corriente de entrada (fermentado de lactosuero)

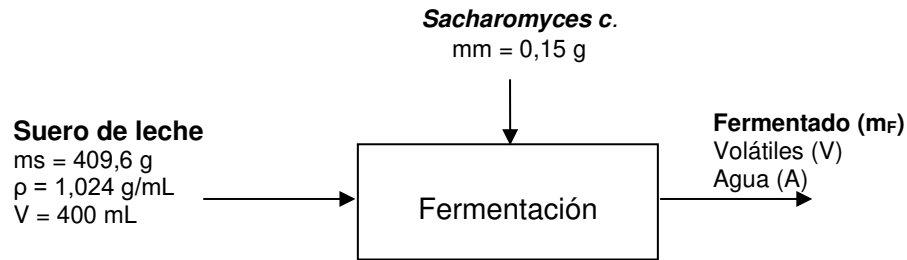
ANEXO II. Determinación de platos teóricos mediante McCabe Thiele

ANEXO III. Resultados de simulación en Aspen HYSYS V12.1

## ANEXO I

### Cálculo de la composición de corriente de entrada a la destilación simple

#### Balance de Masa:



**Figura Al.1.** Balance de masa general

#### Cálculo del fermentado

$$\begin{aligned}
 m_F &= m_S + m_m \\
 m_F &= (409,6 + 0,15)g \\
 m_F &= 409,75 g
 \end{aligned}$$

La concentración total de volátiles se determinó a partir de la suma de los destilados obtenidos en las diferentes etapas (cabeza, corazón, colas) de los resultados presentados en el documento de referencia y se muestran en la Tabla Al.1.

**Tabla Al.1.** Concentración de volátiles obtenidos del destilado de suero de leche

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

Se conoce que la concentración de etanol obtenida (Et) es de 29,53 g etanol/L de suero de leche y se suma a los volátiles obtenidos previamente.

$$V = V_T + Et$$

$$V = 4587,75 + 29530,0 \left(\frac{mg}{L}\right)$$

$$V = 34,11775 \left(\frac{g}{L}\right)$$

Se conoce que se tratan 0,4 litros de suero de leche, por lo que se obtiene la masa de volátiles.

$$V = 34,11775 \left(\frac{g}{L}\right) * 0,4 L$$

$$V = 13,6471 (g)$$

La cantidad de agua (A) se determina de a partir de la masa del fermentado ( $m_F$ ) menos la masa de los volátiles.

$$A = 409,75 (g) - 13,6471 (g) = 396,1029 (g)$$

Con las masas de todos los componentes conocidos se determinó la composición del fermentado de suero de leche y se muestran en la Tabla Al.2.

**Tabla Al.2.** Composición másica del destilado.

	<b>Fórmula</b>	<b>Peso molecular (g/mol)</b>	<b>Composición (%)</b>
<b>Acetaldehído</b>	CH <sub>3</sub> CHO	44	0,026%
<b>Acetato de etilo</b>	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	88	0,019%
<b>2-butanol</b>	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> O	74	0,015%
<b>1-propanol</b>	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> O	60	0,050%
<b>1-butanol</b>	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> O	74	0,003%
<b>2-metil-1-propanol</b>	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> O	74	0,089%
<b>2-metil-1-butanol</b>	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> O	88	0,038%
<b>3-metil-1-butanol</b>	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> O	88	0,201%
<b>Etanol</b>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	46	2,883%
<b>Ácido acético</b>	CH <sub>3</sub> COOH	60	0,007%
<b>agua</b>	H <sub>2</sub> O	18	96,669%



Ejemplo de cálculo de la composición másica para el etanol.

$$\%_{et} = \frac{29530}{1024375} * 100$$
$$\%_{et} = 2,883 \%$$

## ANEXO II

### Determinación de platos teóricos con McCabe Thiele

Se asume que se trata de una mezcla binaria de agua – etanol.

En la Tabla All.1 se muestran las condiciones del sistema para determinar realizar los balances de masa

**Tabla All.1** Condiciones del sistema

<b>Composición %molar</b>	Agua	98,7	Nomenclatura
	Etanol	1,3	
<b>Temperatura entrada</b>	°C	36	
<b>Presión entrada</b>	Atm	1	
<b>Flujo</b>	kmol/h	100	
<b>Conversión % molar</b>	Domos	88	$X_D$
	Fondos	1	$X_W$

#### Balance de masa

$$F = D + W$$

$$F * Z_F = D * x_D + W * x_W$$

$$D = \frac{F * Z_F - W * X_W}{X_D}$$

$$W = F - D$$

$$D = \frac{F(Z_F - X_W)}{X_D - X_W}$$

$$D = \frac{100 * (0,013 - 0,01)}{(0,88 - 0,01)}$$

$$D = 0,345 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

$$W = 99,655 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

## Curva de equilibrio

Se calcula la presión de vapor de los componentes a diferentes temperaturas, para ello se aplica la Ecuación de Antoine.

**Tabla AII.2** Constantes de Antoine.

	Fórmula	A	B	C	T ebullición (°C)	Concentración % molar
<b>Etanol</b>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	8,11220	1592,864	226,184	78,298	1,3%
<b>Agua</b>	H <sub>2</sub> O	7,96681	1668,21	228,00	100,001	98,7%
<b>P abs [mmHg]</b>	760					

Ejemplo de cálculo de la presión de vapor para el etanol a 78,298 °C.

$$\log_{10} P^* = A - \frac{B}{T+C}$$

$$\log_{10} P^* = 8,11220 - \frac{1592,864}{78,298 + 226,184}$$

$$P^* = 760,05 \text{ mmHg}$$

A continuación, se determina las fracciones molares en la fase líquida y en la fase de vapor a través de las ecuaciones de la Ley de Raoult.

$$x_A = \frac{P - P^*_B}{P^*_A - P^*_B}$$

$$x_A = \frac{760,05 - 331,5}{760,05 - 331,5} = 1,0$$

$$y_A = \frac{x_A * P^*_A}{P}$$

$$y_A = \frac{1,0 * 760,05}{760} = 1,0$$

En la Tabla AII.3 se presentan los resultados del cálculo de la curva de equilibrio.

**Tabla AII.3** datos de curva de equilibrio

T	P vapor A	P vapor B	x <sub>A</sub>	y <sub>A</sub>	Volatilidad promedio	Y equilibrio
78,3	760,0543656	331,4994939	1,00	1,00	2,29277685	1,00
79	781,3467469	341,1153047	0,95	0,98	2,290564909	0,98
80	812,6251847	355,257918	0,88	0,95	2,287423147	0,95
81	844,9397887	369,889613	0,82	0,91	2,284302557	0,91
82	878,3171053	385,0236611	0,76	0,88	2,281202934	0,88
83	912,784131	400,6735809	0,70	0,84	2,278124075	0,84
84	948,3683146	416,8531397	0,65	0,81	2,275065783	0,80
85	985,0975595	433,576356	0,59	0,77	2,272027858	0,77
86	1023,000226	450,8575008	0,54	0,73	2,269010107	0,73
87	1062,105133	468,7110995	0,49	0,69	2,266012336	0,69
88	1102,441562	487,1519333	0,44	0,64	2,263034356	0,64
89	1144,039254	506,1950412	0,40	0,60	2,260075979	0,60
90	1186,928416	525,8557218	0,35	0,55	2,257137019	0,55
91	1231,139724	546,149534	0,31	0,51	2,254217294	0,51
92	1276,704319	567,0922994	0,27	0,46	2,251316621	0,46
93	1323,653812	588,7001035	0,23	0,41	2,248434822	0,41
94	1372,020286	610,9892969	0,20	0,35	2,24557172	0,35
95	1421,836296	633,976497	0,16	0,30	2,24272714	0,30
96	1473,134871	657,6785894	0,13	0,24	2,23990091	0,24
97	1525,949514	682,1127287	0,09	0,19	2,237092859	0,19
98	1580,314207	707,2963404	0,06	0,13	2,234302819	0,13
99	1636,263406	733,2471219	0,03	0,06	2,231530623	0,06
100	1693,832048	759,9830433	0,00	0,00	2,228776106	0,00

**2,26046212**

Ejemplo de cálculo de Volatilidad para T° = 85

$$\alpha_{AB} = \frac{y_A/x_A}{(1-y_A)/(1-x_A)}$$

$$\alpha_{AB} = \frac{0,77/0,59}{(1-0,77)/(1-0,59)} = 2,326$$

Ejemplo de cálculo para curva de equilibrio a T° = 85

$$y = \frac{\bar{\alpha}_{AB} x_A}{1 + (\bar{\alpha}_{AB} - 1)x_A}$$

$$y = \frac{2,2605 * 0,59}{1 + (2,2605 - 1) * 0,59} = 0,77$$

## Curva de alimentación

Se calcula de la temperatura de burbuja mediante iteraciones, variando la temperatura y calculando las presiones de vapor mediante la ecuación de Antoine.

**Tabla AII.4** datos de curva de equilibrio

Temperatura de Burbuja				
T asumida (°C)	99,6	xi	P vapor [mmHg]	yi
Etanol	0,013		1670,608002	0,02858
Agua	0,987		749,1932964	0,97297
<b>SUMA</b>				1,00154

**Tabla AII.5** se presentan las condiciones para calcular la curva de alimentación

<b>T Burbuja</b>	°C	99,6
<b>T entrada</b>	°C	36
<b>Cp</b>	Etanol	0,159
<b>Kj/mol°C</b>	Agua	0,0754
$\bar{\lambda}$	Etanol	841
<b>KJ/Kg</b>	Agua	2256,4
<b>Fracción molar</b>	Etanol	0,013
	Agua	0,987
<b>Peso molecular promedio (g/mol)</b>	Etanol	46
	Agua	18

Ejemplo de cálculo del valor de “q”

$$q = 1 + \frac{\bar{C}_p(T_B - T_F)}{\bar{\lambda}}$$

$$q = 1 + \frac{0,07648 * (99,6 - 36)}{2237,99 * 0,01836} = 1,12$$

Cálculo de recta de alimentación

$$Y = \frac{q}{q-1}X - \frac{Z_F}{q-1}$$

$$y = 9,4486x - 0.1098$$

Cálculo de reflujo

$$R_{min} = \frac{X_D - Y_F}{Y_F - Z_F}$$

$$R_{min} = \frac{0,88 - 0,013}{0,04 - 0,013} = 31,11$$

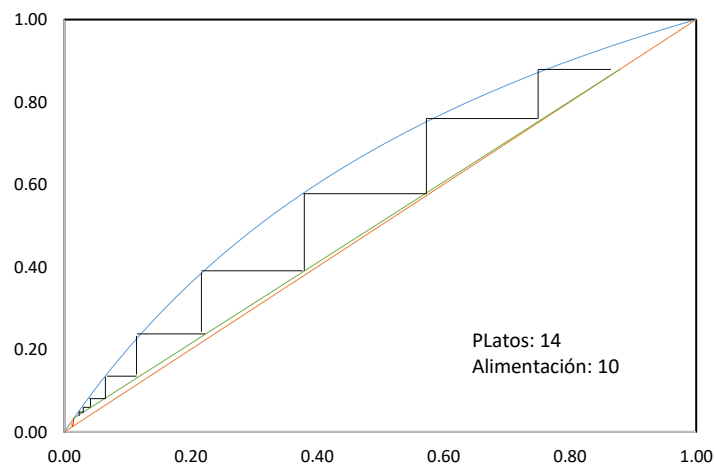
$$R_{op} = 1.5 * R_{min} = \mathbf{46,67}$$

Cálculo de recta de zona de enriquecimiento (ROE)

$$ROE = \frac{R}{R + 1} x + \frac{X_D}{R + 1}$$

$$\mathbf{ROE = 0,979 x + 0,0184}$$

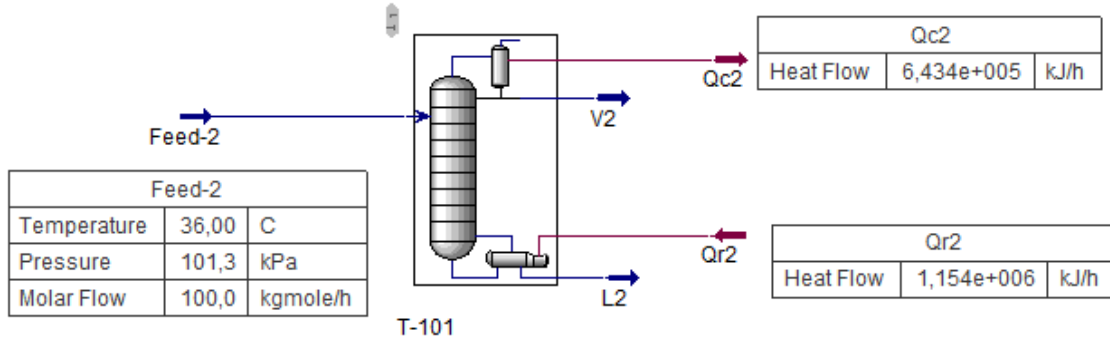
Gráfica de aplicación de McCabe Thiele con el número de platos determinados



## ANEXO III

### Resultados de Simulación con Modelo NRTL

Esquema de simulación de destilación simple con NRTL, 14 platos y alimentación en el plato 10, reflujo 46,67 (Condición 1)



**Figura AIII.1** Esquema destilación NRTL (Condición 1)

Resultados de la composición del destilado y los residuos

The screenshot shows the 'Worksheet' tab in Aspen Plus with the following composition data:

	Feed-2	V2	L2
Acetaldehyde	0,0001	0,0000	0,0001
E-Acetate	0,0000	0,0115	0,0000
2-Butanol	0,0000	0,0000	0,0000
1-Propanol	0,0002	0,0006	0,0002
1-Butanol	0,0000	0,0000	0,0000
i-Butanol	0,0002	0,0005	0,0002
2-M-1-C4ol	0,0001	0,0000	0,0001
3-M-1-C4ol	0,0004	0,0000	0,0004
Ethanol	0,0115	0,8243	0,0087
AceticAcid	0,0000	0,0000	0,0000
H2O	0,9874	0,1631	0,9902

**Figura AIII.2** Composición del destilado NRTL (Condición 1)

Esquema de simulación de destilación simple con NRTL, 19 platos y alimentación en el plato 16, reflujo 3,03 (Condición 2)

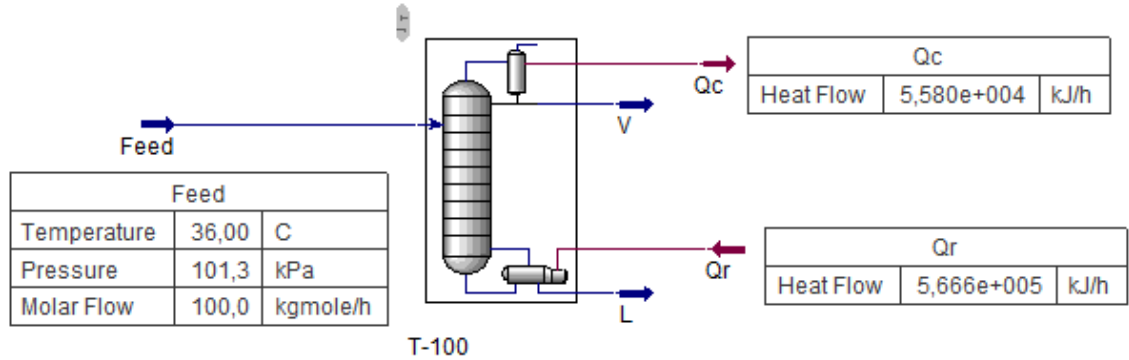


Figura AIII.3 Esquema destilación NRTL (condición 2)

Resultados de composición de destilado y residuos

The screenshot shows the Aspen Plus software interface with the 'Worksheet' tab selected. The table displays the composition of the Feed, Vapor (V), and Liquid (L) streams for various chemical species.

	Feed	V	L
AcetAldehyde	0.0001	0.0000	0.0001
E-Acetate	0.0000	0.0115	0.0000
2-Butanol	0.0000	0.0067	0.0000
1-Propanol	0.0002	0.0244	0.0001
1-Butanol	0.0000	0.0002	0.0000
i-Butanol	0.0002	0.0453	0.0001
2-M-1-C4ol	0.0001	0.0000	0.0001
3-M-1-C4ol	0.0004	0.0000	0.0004
Ethanol	0.0115	0.5569	0.0096
AceticAcid	0.0000	0.0000	0.0000
H2O	0.9874	0.3551	0.9896

Figura AIII.4 Composición del destilado (condición 2)



## Resultados de Simulación con Modelo UNIQUAC

Esquema de simulación de destilación simple con UNIQUAC, 14 platos y alimentación en el plato 10, reflujo 46,67 (Condición 1)

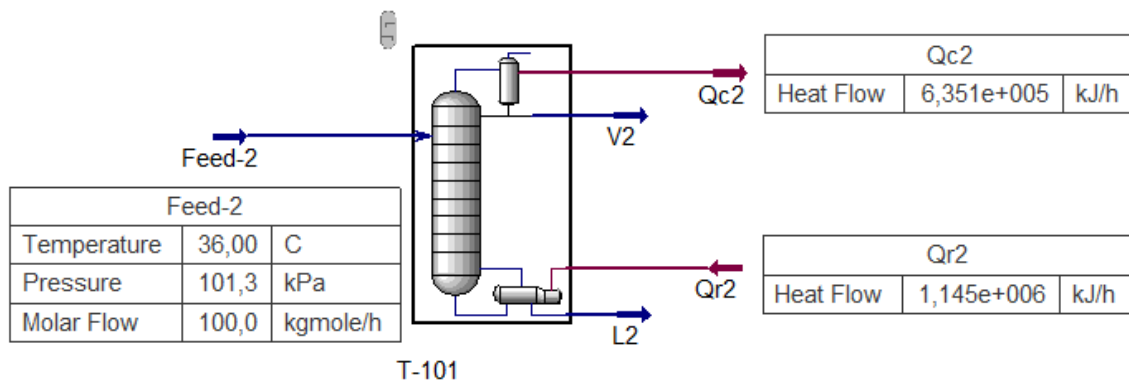


Figura AIII.5 Esquema destilación UNIQUAC (condición 1)

Resultados de composición de destilado y residuos

Component	Feed-2	V2	L2
Acetaldehyde	0,0001	0,0319	0,0000
E-Acetate	0,0000	0,0115	0,0000
2-Butanol	0,0000	0,0001	0,0000
1-Propanol	0,0002	0,0010	0,0002
1-Butanol	0,0000	0,0000	0,0000
i-Butanol	0,0002	0,0006	0,0002
2-M-1-C4ol	0,0001	0,0000	0,0001
3-M-1-C4ol	0,0004	0,0000	0,0004
Ethanol	0,0115	0,7904	0,0088
AceticAcid	0,0000	0,0000	0,0000
H2O	0,9874	0,1645	0,9902

Figura AIII.6 Composición del destilado con UNIQUAC (condición 1)

Esquema de simulación de destilación simple con UNIQUAC, 19 platos y alimentación en el plato 16, reflujo 3,03 (Condición 2)

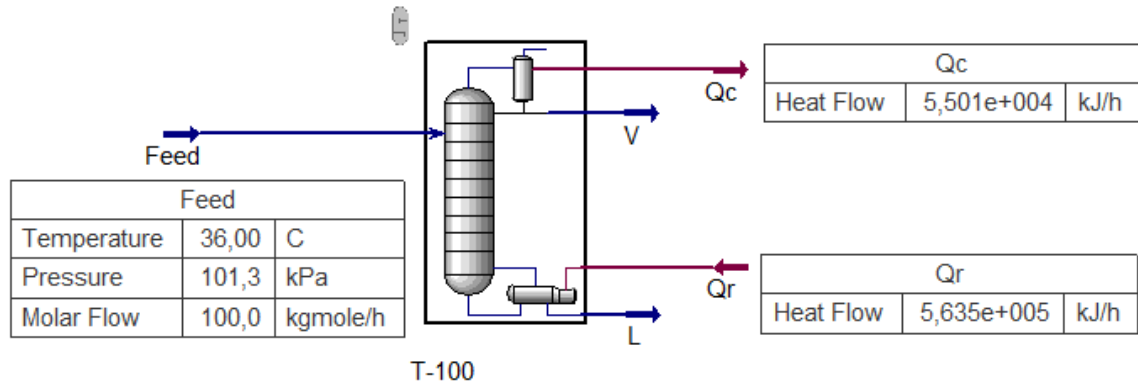


Figura AIII.7 Esquema destilación UNIQUAC (condición 2)

Resultados de composición de destilado y residuos

	Feed	V	L
AcetAldehyde	0,0001	0,0318	0,0000
E-Acetate	0,0000	0,0115	0,0000
2-Butanol	0,0000	0,0072	0,0000
1-Propanol	0,0002	0,0219	0,0001
1-Butanol	0,0000	0,0003	0,0000
i-Butanol	0,0002	0,0394	0,0001
2-M-1-C4ol	0,0001	0,0000	0,0001
3-M-1-C4ol	0,0004	0,0000	0,0004
Ethanol	0,0115	0,5540	0,0096
AceticAcid	0,0000	0,0000	0,0000
H2O	0,9874	0,3340	0,9897

Figura AIII.8 Composición del destilado con UNIQUAC (condición 2)