



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

FACULTAD DE CIENCIAS

CARRERA DE INGENIERÍA QUÍMICA

**“SIMULACIÓN Y VALIDACIÓN DE UN PROCESO DE
DESHIDRATACIÓN DE tert-BUTANOL UTILIZANDO UN
PROCESO DE COLUMNA DE PARED DIVISORIA MEDIANTE
DESTILACIÓN AZEOTRÓPICA HETEROGÉNEA”**

Trabajo de titulación

TIPO: Propuesta Tecnológica

Presentado para optar el grado académico de:

INGENIERO QUÍMICO

AUTOR: RICHARD CARLOS ROJAS QUINTERO

DIRECTOR: ING. JUAN PABLO CHUQUÍN VASCO

Riobamba – Ecuador

2021

© 2021, Richard Carlos Rojas Quintero


Se autoriza la reproducción total o parcial, con fines académicos, por cualquier medio o procedimiento, incluyendo cita bibliográfica del documento, siempre y cuando se reconozca el Derecho del Autor.

Yo, Richard Carlos Rojas Quintero, declaro que el presente trabajo de titulación es de mi autoría y los resultados del mismo son auténticos. Los textos en el documento que provienen de otras fuentes están debidamente citados y referenciados.

Como autor, asumo la responsabilidad legal y académica de los contenidos de este trabajo de titulación; el patrimonio intelectual pertenece a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo.

Riobamba, 15 de abril de 2021

RICHARD
CARLOS
ROJAS
QUINTERO



Firmado digitalmente
por RICHARD CARLOS
ROJAS QUINTERO
Fecha: 2021.04.20
15:32:37 -05'00'

Richard Carlos Rojas Q.




CI. 080331369-1

ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

FACULTAD DE CIENCIAS

CARRERA DE INGENIERÍA QUÍMICA

El Tribunal del Trabajo de Titulación certifica que: El trabajo de titulación; tipo **“SIMULACIÓN Y VALIDACIÓN DE UN PROCESO DE DESHIDRATACIÓN DE tert-BUTANOL UTILIZANDO UN PROCESO DE COLUMNA DE PARED DIVISORIA MEDIANTE DESTILACIÓN AZEOTRÓPICA HETEROGÉNEA.”** realizado por el señor: RICHARD CARLOS ROJAS QUINTERO, ha sido minuciosamente revisado por los Miembros del Trabajo de Titulación, el mismo que cumple con los requisitos científicos, técnicos, legales, en tal virtud el Tribunal Autoriza su presentación.

	FIRMA	FECHA
Ing. Adrián Alejandro Rodríguez Pinos PRESIDENTE DEL TRIBUNAL	 Firmado electrónicamente por: ADRIAN ALEJANDRO RODRIGUEZ PINOS	2021-04-14
Ing. Juan Pablo Chuquín Vasco DIRECTOR DE TRABAJO DE TITULACIÓN	 Firmado electrónicamente por: JUAN PABLO CHUQUIN	2021-04-14
Ing. Daniel Antonio Chuquín Vasco MIEMBRO DEL TRIBUNAL	 Firmado electrónicamente por: DANIEL ANTONIO CHUQUIN VASCO	2021-04-14

DEDICATORIA

El presente trabajo de titulación lo dedico a Dios, quien es el que guía mi camino, además de enseñarme y ser el inspirador a que este logro que lo voy a tener será para poder aportar algo al mundo, compartir y cuidar a los demás, siempre dándome fuerzas, guiándome y estando a mi lado en todo el proceso.

A mis padres Mercedes y Washington quienes me apoyaron para que siga estudiando en todo el proceso, por el gran sacrificio que hicieron todos los años de mi vida, gracias por permitirme superarme y darme el mejor regalo el estudio.

Richard Rojas

AGRADECIMIENTO

Principalmente agradezco a Dios por darme la fortaleza y estar a mi lado todos estos años de mi vida, siempre enseñándome más y cuidándome, por permitirme escalar una pequeña grada de los sueños que me he propuesto y sé que en todo mi camino a lo largo de mi vida sea corta o larga estará a mi lado.

De igual manera agradezco a mis padres Washington Rojas y Mercedes Quintero por todos estos años de mi vida acompañarme y seguirme apoyando en mis estudios, y por enseñarme que la mejor herencia que pueden dejar los padres es el estudio, sé que todo lo que han hecho por mí no podría ser recompensado, y por eso les agradezco de todo corazón por apoyarme.

De igual manera agradezco a mis hermanos, a mis amigos más cercanos que me han apoyado y ayudado en algunos momentos difíciles gracias a todos por su confianza y por apoyarme a lo largo de la vida estudiantil, aunque esta vida sigue de largo porque es un pequeño peldaño de la escalera enorme que es el conocimiento, más que todo poder compartirlo y poner un granito de arena al mundo con todo lo que vaya aprendiendo a lo largo de mi vida profesional y estudiantil.

Richard Rojas

TABLA DE CONTENIDO

ÍNDICE DE TABLAS	x
ÍNDICE DE FIGURAS	xi
ÍNDICE DE GRÁFICOS	xiii
ÍNDICE DE ANEXOS.....	xiv
INDICE DE ABREVIATURAS	xv
RESUMEN	xvi
SUMMARY	xvii
CAPITULO I	
1. INTRODUCCIÓN	1
1.1. Antecedentes	1
1.2. Planteamiento del problema.	2
1.3. Justificación.....	3
1.1. Objetivo.....	4
1.1.1. Objetivo General	4
1.1.2. Objetivos Específicos	5
1.2. Alcance.....	6
CAPITULO II	
2. MARCO TEÓRICO	7
2.1. Estado del arte	7
2.2. Bases Teóricas.....	10
2.2.1. Destilación.....	10
2.2.1.1. Destilación azeotrópica.	11
2.2.1.2. Azeótropos.	13
2.2.1.3. Agente de Arrastre.....	15
2.2.2. Proceso convencional de dos columnas	16
2.2.3. Proceso alternativo de Columnas de Pared Divisoria Azeotrópica (A-DWC)	17

2.2.3.1.	Tert-Butanol	18
2.2.4.	DWSIM – Simulador de procesos químicos	21
2.2.4.1.	Algoritmos Flash	23
2.2.4.2.	Paquetes Termodinámicos	24
2.2.4.3.	Modelos de operación de la unidad de simulación de procesos	27
2.3.	Marco Legal	29
2.3.1.	Nacional	29
2.3.2.	Internacional.....	32
CAPITULO III		
3.	METODOLOGÍA	33
3.1.	Etapas de la Metodología.	33
3.1.1.	Parámetros de Funcionamiento.....	35
3.1.2.	Diagrama de flujo de procesos (PFD).....	35
3.1.3.	Parámetros del proceso a simular	36
3.1.3.1.	Generales.....	36
3.1.3.2.	Columna de Destilación Azeotrópica (C-1).....	36
3.1.3.3.	Columna de Destilación Azeotrópica (C-2).....	39
3.1.3.4.	Columna de Rectificación Indivisa (C-3)	40
3.1.3.5.	Decantador y Divisor de Corriente	42
3.2.	Simulación en DWSIM.	42
3.2.1.	Procedimiento para realizar la simulación	43
3.2.1.1.	Crear y configurar nuevo modelado y variables	43
3.2.1.2.	Configurar corrientes y operaciones, establecer parámetros y condiciones.	44
3.2.1.3.	Comprobar el funcionamiento y los resultados.....	49
3.2.1.4.	Diagrama del proceso	50
3.3.	Análisis estadístico	51
CAPITULO IV		
4.	GESTIÓN DEL PROYECTO	52
4.1.1.	Cronograma.....	52

4.1.2.	Presupuesto	53
4.1.3.	Recursos y Materiales	53
4.2.	Resultados, Discusión y Análisis De Resultados	53
4.2.1.	Simulación en DWSIM	53
4.2.1.1.	Comparación de resultados económicos	54
4.2.1.2.	Resultados obtenidos en la simulación en DWSIM	55
4.2.2.	Balance de materia	56
4.2.2.1.	Balance general	57
4.2.2.2.	Balance de columna C-1.....	58
4.2.2.3.	Balance de columna C-2.....	60
4.2.2.4.	Balance de la columna C-3.....	61
4.2.2.5.	Balance en el Decantador.....	63
4.2.3.	Balance de Energía.....	64
4.2.3.1.	Determinación de grados de libertad en el proceso global.....	65
4.2.3.2.	Balance de energía C-1.....	66
4.2.3.3.	Balance de energía C-2.....	67
4.2.3.4.	Balance de energía C-3.....	68
4.2.3.5.	Balance de energía en el condensador.....	70
4.2.3.6.	Balance de energía en el decantador.....	71
4.2.4.	Perfiles de composición y McCabe-Thiele	72
4.2.5.	Validación de resultados.....	75

CONCLUSIONES

RECOMENDACIONES

BIBLIOGRAFÍA

ANEXOS

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1-2.	Propiedades físicas del tert-butanol.....	19
Tabla 2-2.	Operaciones usadas en la simulación en DWSIM.	27
Tabla 3-2.	Normativa sobre software libre	28
Tabla 1-3.	Parámetros generales de la simulación	35
Tabla 2-3.	Condiciones C-1.....	35
Tabla 3-3.	Características de simulación C-1 en CAPE-OPEN	36
Tabla 4-3.	Condiciones C-2.....	37
Tabla 5-3.	Características de simulación C-2 en CAPE-OPEN.....	38
Tabla 6-3.	Condiciones C-3.....	39
Tabla 7-3.	Características de simulación C-3 en CAPE-OPEN.....	40
Tabla 8-3.	Condiciones de operación de Decantador	41
Tabla 9-3.	Condiciones de operación de Divisor de Corriente	41
Tabla 1-4.	Cronograma del proyecto.	52
Tabla 2-4.	Presupuesto del proyecto.....	53
Tabla 3-4.	Datos resultados económicos del proceso convencional y A-DWC	54
Tabla 4-4.	Resultados de energía obtenidos en la simulación	55
Tabla 5-4.	Resultados obtenidos en la simulación de A-DWC.....	55
Tabla 6-4.	Análisis de Grados de Libertad para el proceso	65
Tabla 7-4.	Resultados de la validación de la simulación	67
Tabla 8-4.	Resultados de la validación de la simulación	67

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1-2. Presentación de una columna de separación de una mezcla.....	7
Figura 2-2. Configuraciones de columnas para la separación de una mezcla	8
Figura 3-2. Diagramas de fase y proceso convencional azeotrópica.....	12
Figura 4-2. Equilibrio liquido-vapor en disoluciones no ideales	13
Figura 5-2. Desviaciones positivas y negativas Ley de Raoult.....	14
Figura 6-2. Proceso convencional de deshidratación de tert-butanol.....	16
Figura 7-2. Proceso A-DWC para la deshidratación de tert-butanol.....	17
Figura 8-2. Proceso de obtención de tert-butanol.	19
Figura 9-2. Azeótropo tert-butanol y agua	20
Figura 10-2. Pantalla de inicio de IU clásica.....	21
Figura 11-2. Problemas al momento de elegir un paquete termodinámico	24
Figura 12-2. Elección modelo termodinámico	25
Figura 13-2. Elección modelo termodinámico	25
Figura 1-3. Etapas de la Metodología.....	32
Figura 2-3. Diagrama de procesos de separación tert-butanol (A-DWC).....	34
Figura 3-3. Columna azeotrópica C-1.	37
Figura 4-3. Columna azeotrópica C-2	39
Figura 5-3. Columna azeotrópica C-3.	41
Figura 6-3. Procedimiento para simular en DWSIM.....	42
Figura 7-3. Pantallas de acceso y creación de una nueva simulación en DWSIM.....	43
Figura 8-3. Configuración en los flujos de materia	44
Figura 9-3. Configuración en CAPE-OPEN para C-1	44
Figura 10-3. Configuración en CAPE-OPEN para C-2	45
Figura 11-3. Configuración en CAPE-OPEN para C-3	45
Figura 12-3. Configuración para el mezclador	46
Figura 13-3. Configuración para el divisor de corriente	46
Figura 14-3. Configuración para el bloque de reciclar	47
Figura 15-3. Configuración para el separador de componentes.....	47
Figura 16-3. Configuración para el condensador.....	48
Figura 17-3. Propiedades y resultados en DWSIM	49
Figura 18-3. Diagrama de proceso (A-DWC) simulado en DWSIM	50
Figura 1-4. Diagrama de balance general de masa	57
Figura 2-4. Diagrama de balance de masa columna C-1	59
Figura 3-4. Diagrama de balance de masa columna C-2	60
Figura 4-4. Diagrama de balance de masa columna C-3	62

Figura 5-4. Diagrama de balance decantador	63
Figura 6-4. Diagrama de proceso, determinación Grados de Libertad.....	65
Figura 7-4. Diagrama de balance de energía C-1	66
Figura 8-4. Diagrama de balance de energía C-2	67
Figura 9-4. Diagrama de balance de energía C-3	69
Figura 10-4. Diagrama de balance de condensador	70
Figura 11-4. Diagrama de balance del decantador.....	71

ÍNDICE DE GRÁFICOS

Gráfico 1-4. Perfil de composición líquida C-1.....	72
Gráfico 2-4. Perfil de McCabe Thiele C-1	73
Gráfico 3-4. Perfil de composición líquida C-2.....	73
Gráfico 4-4. Perfil de McCabe Thiele C-2.	73
Gráfico 5-4. Perfil de composición líquida C-3.....	74
Gráfico 6-4. Perfil de McCabe Thiele C-3.	74

ÍNDICE DE ANEXOS

ANEXO A	Resultados del proceso obtenidos en DWSIM
ANEXO B	Clasificación de columna rápida y costos determinados en DWSIM
ANEXO C	Abstract presentado en DWSIM
ANEXO D	Certificado avalado por DWSIM

INDICE DE ABREVIATURAS

VARIABLE	DESCRIPCIÓN
AQ	Flujo de fase acuosa
A-DWC	Columna azeotrópica de pared divisoria
B	Fondos
C-1	Columna pre-concentradora
C-2	Columna HAD
C-3	Columna de rectificación
DWC	Columna de pared divisoria
ETBE	Éter etil ter-butilico
HAD	Destilación Azeotrópica Heterogénea
HX	Intercambiador de calor
IU	Interfaz de Usuario
L	Reflujo
MPC	Modelos de control predictivo
MTE	Metil ter-butil éter
NF	Etapas de alimentación fresca
NT	Número total de platos
NRTL	Non Random Two Liquids
OR	Flujo de fase orgánica
PID	Control integrados derivativo proporcional
TAC	Costo anual total
TBPH	Hidroperoxido de tert-butiro
t-butanol	tert-butanol
V	Ebullición de vapor
xtb	Fracción molar de tert-butanol
xw	Fracción molar de agua
xc	Fracción de ciclohexano
β L	Relación de división líquida

RESUMEN

En el presente trabajo de titulación se tuvo como finalidad la simulación y validación de un proceso de deshidratación de tert-butanol utilizando un proceso de columna de pared divisoria mediante destilación azeotrópica heterogénea. En el desarrollo de la simulación se usaron los datos en bibliografía, posteriormente los cuales se adaptaron para la simulación en DWSIM, utilizando tert-butanol, agua y como agente de arrastre ciclohexano, el método global termodinámico del sistema ternario fue Non Random Two Liquids (NRTL) el cual interpreto la no idealidad del equilibrio del líquido-vapor, en la simulación se diseñó un proceso alternativo al convencional de Destilación Azeotrópica Heterogénea (HAD) de dos columnas, utilizando un sistema de columnas de pared divisoria azeotrópicas (A-DWC), favoreciendo a la disminución de consumo energético, mediante el aprovechamiento del calor de las columnas, para la simulación se usaron 3 columnas, C-1 que actúa como una columna pre concentradora de la sustancia, C-2 que actúa como una columna HAD y la C-3 que actúa como una columna de rectificación, la alimentación ingreso en C-1 a 25°C y 1 atm de presión formando un azeótropo ternario heterogéneo deseable entre las 3 sustancias, el cual permite la separación de los mismos, se considera que las columnas C-1 y C-2 tienen una caída de presión en los platos de 689.010 Pa, por último se considera la relación de división líquida β_L donde se puede controlar el flujo teniendo una relación optima de 0.9, con todos los parámetros y datos necesarios se simulo la A-DWC en DWSIM. Los resultados obtenidos fueron tabulados y posteriormente validados mediante el análisis de varianza ANOVA, teniendo errores menores al 7% de la simulación respecto a los resultados bibliográficos, asimismo, el Costo Anual Total (TAC) es de 1.173 respecto a las simulaciones convencionales recalcando que su disminución en consumo energético también es notable, la simulación se pudo publicar en la página de DWSIM.

Palabras clave: <INGENIERÍA Y TECNOLOGÍA QUÍMICA> <COLUMNAS DE PARED DIVISORIA AZEOTRÓPICA> <DESTILACION AZEOTRÓPICA> <TERTBUTANOL> <AZEÓTROPO> <AGENTE DE ARRASTRE><RELACIÓN DE DIVISIÓN LÍQUIDA><SIMULADOR DWSIM>

LUIS ALBERTO
CAMINOS
VARGAS

Firmado digitalmente por LUIS
ALBERTO CAMINOS VARGAS
Nombre de reconocimiento (DN):
c=EC, l=RIOBAMBA,
serialNumber=0602766974, cn=LUIS
ALBERTO CAMINOS VARGAS
Fecha: 2021.03.19 17:05:15 -05'00'



0792-DBRAI-UPT-2021

SUMMARY

The objective of this study was the simulation and validation of a Tert-Butanol dehydration process using a dividing wall column process by heterogeneous azeotropic distillation. In the development of the simulation, bibliographic data were used, which were later adapted for the simulation in DWSIM, using Tert-Butanol, water, and cyclohexane as an entraining agent, the global thermodynamic method of the ternary system was Non-Random Two Liquids (NRTL) which interpreted the non-ideal of the liquid-vapour equilibrium. In the simulation, an alternative process to the conventional Heterogeneous Azeotropic Distillation (HAD) of two columns was designed, using an azeotropic dividing wall column system (A-DWC), helping to reduce energy consumption, by taking advantage of the heat of the columns, 3 columns were used for the simulation, C-1 which acts as a pre-concentrator column of the substance, C-2 acting as a HAD column and C-3 acting as a rectification column, the source entered C-1 at 25°C and 1 atm of pressure, forming a desirable heterogeneous ternary azeotrope between the 3 substances, which allows their separation, Columns C-1 and C-2 are considered to have a plate pressure drop of 689.010 Pa. Finally, the liquid division ratio β_L is considered, where the flow can be controlled having an optimal ratio of 0.9. with all the necessary parameters and data, the A-DWC was simulated in DWSIM. The results obtained were tabulated and subsequently validated by the analysis of variance ANOVA, having errors of less than 7% of the simulation concerning the bibliographic results. Likewise, the Total Annual Cost (TAC) is 1,173 concerning conventional simulations, emphasizing that its decrease in energy consumption is also notable. This simulation was posted on the DWSIM page.

Keywords: <ENGINEERING AND CHEMICAL TECHNOLOGY> <AZEOTROPIC DIVIDING WALL COLUMNS> <AZEOTROPIC DISTILLATION> <TERTBUTANOL> <AZEOTROPE> <DRAWING AGENT> <LIQUID DIVISION RATIO> <DWSIM SIMULATOR>

CAPITULO I

1. INTRODUCCIÓN

1.1. Antecedentes

Los seres humanos en su mejora continua han buscado y desarrollado las herramientas necesarias para avanzar a lo largo del tiempo, basándose en la investigación científica y tecnológica, con lo cual se ha logrado reducir esfuerzos de aquellas actividades de laboratorio o industriales mediante el desarrollo de tecnología, con lo cual lo que implicaba gastos económicos elevados, como creación de plantas pilotos, análisis de laboratorios o diversas actividades industriales y académicas, con lo cual el ser humano se ha ido adaptando e innovando, con la creación de softwares o maquinas inteligentes capaces de realizar cálculos matemáticos, predicciones y simulaciones capaces de adelantarse a los valores o variables que existan en el campo, facilitando el trabajo y el desarrollo investigativo o industrial, con lo cual estas herramientas han ayudado al progreso de la ciencia y a la mejora de la humanidad.

El inicio de los simuladores, fue en la época del renacimiento, donde se plantearon y resolvieron los primeros sistemas de simulación los cuales abarcaron juegos de azar y resultados probabilísticos. Considerando que palabra simulación es del año 1940 y usado desde ese entonces, cuando los científicos Von Neuman y Ulam trabajaban en el proyecto Monte Carlo (Obtención de datos de la ruleta rusa en Monaco). (Bolaños, 2014, pp. 50-102)

Durante la segunda guerra mundial el desarrollo de simuladores fue indispensable en el campo científico, su uso no fue con buenas intenciones pero sirvió para el desarrollo e interpretación de las reacciones nucleares en las experimentaciones de la bomba atómica, los cuales mediante soluciones experimentales hubiesen sido muy costosos y el análisis matemático muy complejo. De igual manera durante la guerra fría se intensificó en la resolución de problemas militares, trayectorias dinámicas de satélites, guiar misiles y armamento. Pero también fueron usados en el ámbito del desarrollo, con la creación de supercomputadores logrando novedosas aplicaciones y mayor cantidad de problemas teóricos y prácticos, para sus resoluciones. (Bolaños, 2014, pp. 50-102)

Fue un auge excesivo cuando las computadoras empezaron a aumentar su velocidad de procesamiento, el uso fue personal y con una mejor animación, lo cual ya no solo se llevaba

a las aulas si no que era aplicado en las empresas e industrias, generalizando su uso en todos los ámbitos de la ciencia y la ingeniería. Hoy en día la difusión del término simulación y sus aplicaciones ha alcanzado un gran número de usuarios los cuales siguen generando nuevas propuestas y desarrollos, los mismos que ayudan al desarrollo industrial y educativo, ya que se conoce su interrelación con las ciencias las cuales permiten la solución de diversas perspectivas en la transformación tecnológica. En el área de enfoque de la propuesta tecnológica el uso de la simulación nos permite la resolución de modelos matemáticos y cálculos ingenieriles complejos, en el área de procesos químicos de diversas operaciones de transformación físico-química, como destilación, mezclado, separadores, etc. Con lo cual se está buscando nuevas formas y diseños para reducir el consumo excesivo de energía, aprovechando el cálculo automático de balances energéticos y de masa, logrando la comprensión del comportamiento de la simulación además de la evaluación de las nuevas adaptaciones y desarrollos, en este caso de estudio de las diversas columnas de destilación, como son las columnas de pared divisoria (DWC). Logrando obtener grados aceptables de precisión con los modelos aplicables.

1.2. Planteamiento del problema.

En la actualidad la producción de tert-Butanol ha sido usada a gran escala en la producción de productos químicos y farmacéuticos, lo cual generalmente se ha obtenido por métodos como hidratación o hidrólisis, siendo necesario un posterior proceso de deshidratación para poder obtener compuestos anhidros de tert-butanol, el cual tiene mayor demanda en el mercado, sin embargo la principal dificultad que se presenta es la formación de un azeótropo homogéneo entre el t-butanol y agua a presión atmosférica. No logrando separar en componentes puros a través de una destilación ordinaria, se usa un método efectivo la destilación azeotrópica el cual mediante el uso de un agente de arrastre se induce a los azeótropos heterogéneos de bajo punto de ebullición con uno o más componentes de los originales generando la formación de fases líquidas inmiscibles que se puedan separar convencionalmente. (Yu et al, 2015, pp. 3384)

En este contexto se necesita la separación de las fases de vapor condensado en la parte superior de la columna, teniendo en cuenta una gran ventaja de poder separar las fases líquido-líquido natural en un decantador. Siendo el agente de arrastre el que se seleccionara cuidadosamente, ya que es el que ayuda a la formación del azeótropo ternario heterogéneo. Cabe recalcar que la técnica de destilación azeotrópica ha perdido aceptación por el alto consumo de energía que demanda un consumo económico elevado, por la

presencia de Intercambiadores de Calor a la cabeza de la columna un condensador y en el fondo un reboiler, siendo esto lo que ha contribuido a buscar nuevas tecnologías en el desarrollo de procesos, teniendo las columnas de pared divisoria (DWC) que permite la separación de mezclas con tres o incluso más componentes, alcanzando un ahorro de energía y económico significativo, logrando reducir el uso de algunos intercambiadores de calor, mediante el aprovechamiento de la relación de división líquida en el proceso. Siendo varios los estudios de aplicación para las columnas azeotrópicas de pared divisoria (A-DWC) para sistemas de destilación azeotrópica de múltiples componentes, los cuales no se han realizado a fondo para la obtención de tert-Butanol anhidro, siendo un aspecto de relevancia considerable el control dinámico del proceso, el cual es más complejo que los sistemas de columnas convencionales debido a que en sus estructuras internas presentan interacciones generando bucles de control. (Yu et al, 2015, pp. 3386)

Para reducir estos costos y estimar el proceso como se llevaría a cabo, el presente trabajo propone la simulación y validación de un sistema de deshidratación de tert-Butanol usando un proceso de columnas de pared divisoria azeotrópica (A-DWC), mediante la multiplataforma para la simulación de procesos químicos DWSIM, teniendo en cuenta que los resultados se compararán tanto con el sistema de deshidratación convencional de dos columnas, así como los valores de la modelación del sistema en mención provenientes de artículos de alto impacto, de esta forma se podrá comparar las variables y analizar la eficiencia del proceso, en cuanto a su aplicación en plantas reales y el consumo energético.

1.3. Justificación

El proceso de deshidratación de tert-Butanol usando un proceso de columnas de pared divisoria, mediante destilación azeotrópica heterogénea es una tecnología nueva en el desarrollo de la simulación, ya que las principales problemáticas presentes es que en los sistemas convencionales de destilación, es que no separan los azeótropos formados y además que en el uso de sistemas de destilación azeotrópica se presenta el consumo excesivo de energía, representando costos económicos muy elevados para la implementación de estos sistemas, debido a esto se trata de reducir el consumo excesivo de energía mediante el empleo de las columnas azeotrópicas de pared divisoria (A-DWC) para azeótropos heterogéneos, mediante la simulación del proceso de deshidratación de tert-butanol utilizando ciclohexano como agente de arrastre, logrando que los el proceso sea eficiente y con los mínimos costos mediante el análisis de parámetros y detalles que la simulación da como resultado, se podría decidir si es factible el proceso.

Se tiene en cuenta que la economía del proceso se considera en términos de costo de energía e inversión de capital en los principales equipos, como lo son columnas de destilación, intercambiadores de calor, además de que no se consideraran ciertos artículos como bombas, válvulas y tuberías que son menos costosas que los equipos principales, así mismo se considera que el control del proceso de una A-DWC presenta mayor complejidad que un sistema convencional de dos columnas, por lo cual se considera el ajuste de ciertos parámetros como la relación de división del líquido (βL) que representa una relación entre la entrada a la columna de destilación azeotrópica y la salida de la columna de rectificación, además de que generan bucles para el control del componente pesado en la parte superior de la alimentación de la columna, usando la división del líquido como una variable manipulada, logrando así la minimización en el consumo de energía.

Además, la simulación de procesos industriales se presenta como una herramienta tecnológica de gran impacto que permite reproducir virtualmente los procesos y estudiar mediante predicciones de variables su comportamiento, tanto como para el diseño, desarrollo, análisis y optimización técnica de los mismos. De esta manera el Ingeniero Químico en su desarrollo profesional se encuentra en la capacidad de la manipulación software especializados y la generación de modelos inteligentes que permitan simular y estudiar las variables que intervienen en los procesos químicos industriales, donde se podrá efectuar mejoras con un bajo costo y sin la necesidad de interactuar con el proceso mediante plantas pilotos, que eran usadas en la antigüedad como sistemas de pruebas para verificar su eficiencia, a su vez, se permitirá la extrapolación posterior en la aplicación de plantas industriales con mayor seguridad, eficiencia y menor costo de fabricación.

Por ese motivo, se ha optado por simular y validar un sistema de deshidratación de tert-Butanol usando columnas de pared divisoria azeotrópica (A-DWC) en el software DWSIM que permita corroborar su eficiencia frente al sistema convencional y comparar los resultados con los valores calculados en artículos de relevancia e impacto.

1.1. Objetivo

1.1.1. Objetivo General

Simular un proceso de deshidratación de tert-Butanol usando columnas de pared divisoria mediante destilación azeotrópica heterogéneas en el simulador DWSIM para validar los datos obtenidos en la simulación respecto a la bibliografía.

1.1.2. Objetivos Específicos

- Determinar el rendimiento obtenido del proceso de deshidratación de tert-Butanol simulando el proceso de columnas de pared divisorias, respecto a procesos de destilación convencional de azeótropos.
- Simular el proceso de deshidratación de tert-Butanol mediante un modelo de tres columnas de pared divisoria azeotrópica (A-DWC), determinando el porcentaje obtenido de tert-Butanol anhidro como producto.
- Validar el proceso de simulación de la obtención de tert-Butanol anhidro, mediante la simulación del proceso mediante el uso del software DWSIM, para corroborar resultados dados en artículos científicos de alto impacto.

1.2. Alcance

El trabajo de simulación de un proceso de deshidratación de tert-Butanol utilizando un proceso de columna de pared divisoria mediante destilación azeotrópica heterogénea, se lo realiza en un software de simulación de procesos químicos gratuito de nombre DWSIM, con lo cual se pretende obtener el valor de salida del azeótropo tert-Butanol luego de separarlo de la mezcla con agua, siendo usado como agente de arrastre ciclohexano, se hace énfasis en que el desarrollo de la simulación va a ser comparado con la simulación desarrollada en la bibliografía, logrando validar los resultados del proceso mediante el uso de un test estadístico ANOVA.

CAPITULO II

2. MARCO TEÓRICO

2.1. Estado del arte

Los procesos de destilación industrial son operaciones con propiedad de transferencia de masa los cuales consumen mucha energía, por lo cual a lo largo del tiempo se han venido llevando a cabo extensas investigaciones sobre diversas configuraciones para la separación de mezclas multicomponentes casi ideales. Por lo cual los avances en investigación han sido acerca de columnas de destilación acopladas térmicamente, siendo este el principio de los conceptos básicos para las columnas de pared divisoria. (Asprion y Kaibel, 2010, p. 139)

Se considera una mezcla de tres componentes casi ideal que consta de los componentes A, B y C con A considerando el menor punto de ebullición y C el de mayor ebullición, son posibles varias configuraciones de columnas de destilación, una forma sencilla de análisis de las diferentes configuraciones para la separación de estas mezclas es el uso de representaciones en forma de red, las cuales nos abren campo a varias combinaciones posibles. (Asprion y Kaibel, 2010, p. 140)

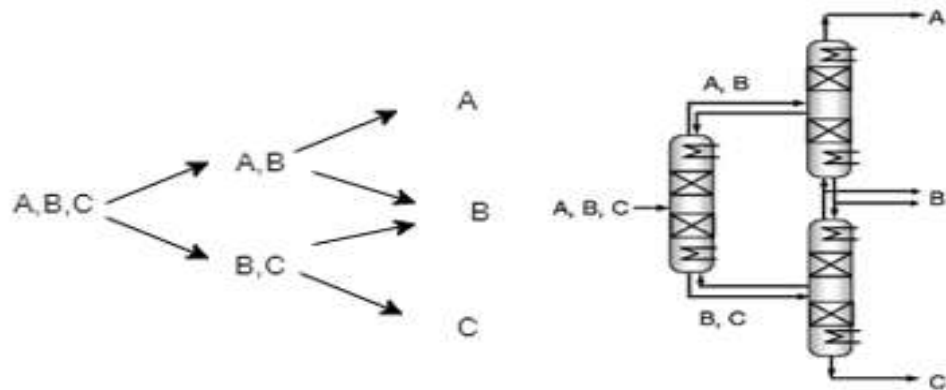


Figura 1-2. Presentación en red y superestructura para la separación de una mezcla de tres componentes en productos puros.

Fuente: (Asprion y Kaibel, 2010, p. 140)

En la figura 1-2., la alimentación representa un nodo y una línea representa la línea de una sección de separación, ya sea como línea de rectificación o extracción del proceso a separar, el número máximo para las secciones de separación es seis, para mezclas de 3 componentes ($n(n-1)$ secciones para una mezcla de componentes). Cualquier

configuración que tenga menos de seis secciones no puede realizar una división reversible. (Asprion y Kaibel, 2010, p. 139)

En la superestructura de Sargent y Gaminibandara (Asprion y Kaibel, 2010, pp. 139), mostrada en la figura 1-2., cada sección de rectificación tiene un condensador y cada sección de desforre tiene un calderín, los cuales representan 6 en total de intercambiadores de calor entre calderines y condensadores, este número mediante las investigaciones puede reducirse mediante el uso de columnas acopladas térmicamente o también denominadas columnas de pared divisoria. La superestructura no cubre todas las configuraciones posibles, ya que solo se consideraron secuencias de columnas de $(n-1)$, sino que son posibles más configuraciones satélite de columnas alrededor de una columna central, o también considerar menos columnas, como es el caso de que es posible dos columnas para una mezcla de cuatro componentes.

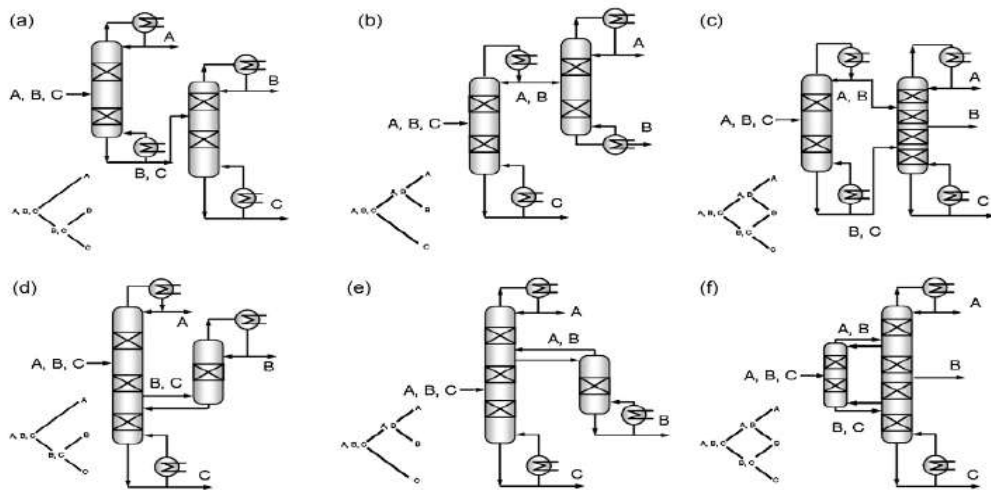


Figura 2-2. Posibles configuraciones para la separación de una mezcla de tres componentes en componentes puros. a) División directa, b) división indirecta, c) columna unida térmicamente, d) rectificador lateral, e) separador lateral y f) totalmente acoplado térmicamente.

Fuente: (Asprion y Kaibel, 2010, p. 140)

En el avance de las columnas de pared divisoria, se necesita tener en cuenta el número de compuestos a separar, para la separación de tres componentes en productos puros, se necesita al menos una secuencia de dos columnas simples de destilación. Cada una tendrá una sección de rectificado y una de desforre, entonces el número de secciones mínimo son cuatro para recibir dos productos puros. Comparado con las columnas de destilación convencional, estos esquemas estudiados con sus configuraciones establecidas, necesitan menor número de intercambiadores de calor, adicional se tiene que las columnas de pared divisoria con el acople térmico necesitan menos cantidad de energía, siendo la figura 2-2-

c., la configuración de pared divisoria y respecto a las demás configuraciones, la que presenta menos número de intercambiadores de calor, desde el punto de vista energético en general, no se espera un menor consumo, pero se necesita un hervidor menos, especialmente si la configuración indica que dos columnas están integradas dentro de una sola. (Žarco et al, 2016)

Wright (Asprion y Kaibel, 2010, p. 141), propuso la primera implementación de las columnas de pared divisoria (DWC), y eso tomo casi 40 años para poder llevarlo a la aplicación industrial a escala, en 1985, las columnas de pared divisoria encontraron su primera aplicación industrial en BASF (Badische Anilin – nd Soda- Fabrik) y bajo las licencias del mismo. A partir de ese momento el desarrollo y configuraciones han dado acogida a las columnas de pared divisoria (DWC), aunque su aplicación no es industrial, por el desconocimiento del uso y fabricación de los mismos, además de que conlleva a una inversión nueva a procesos antiguos, lo que podría ser una ventaja es su reducción respecto a energía, además de que estos sistemas también necesitan un control automático específico.

En la literatura, las columnas de pared divisoria (DWC) son los mejores avances tecnológicos probados en la intensificación de procesos para la separación de mezclas con tres o incluso más componentes en la destilación, permitiendo un ahorro significativo en el consumo de energía, en las investigaciones se detallan varios casos con importantes ahorros de energía. Annakou y Miszey compararon las secuencias de destilación convencionales, los esquemas de integración térmica y la columna de destilación totalmente acoplada térmicamente conocido como DWC. Recientemente, Kiss y Suszwalak demostraron la utilidad de un sistema de columnas azeotrópicas de pared divisoria (A-DWC) para el sistema de deshidratación de bioetanol utilizando n-pentano como agente de arrastre, el resultado fue que A-DWC puede conducir hasta un 20.2% en el ahorro energético. (Yu et al, 2015, p. 3384, Shi et al, 2020, p.21)

Se presentaron modelos de A-DWC simulado como dos columnas térmicamente acopladas y se propuso una estructura de control demostrando el sistema de deshidratación de piridina utilizando tolueno como agente de arrastre, el resultado fue la reducción de 29.48% y 31.41% en el consumo de energía y el costo anual total (TAC), respectivamente. (Yu et al, 2015, p.3384)

Así varios estudios se han llevado a cabo y se han puesto en plan de operación después del uso de software de simulación, ya que estos permiten una aproximación muy válida a lo

que sería la vida real, de igual manera los software de simulación han ido desarrollando y avanzando a lo largo del tiempo, cabe considerar dentro del estudio su control dinámico es mucho más complejo que el de sistemas convencionales, ya que en sus estructuras internas e interacciones entre los bucles de control generados en el sistema, es importante considerar un factor en la simulación de A-DWC que es la relación de división de líquido (βL), ya que en un modelo de dos columnas solo se puede manipular una corriente de líquido dividida, mientras que dos corrientes se pueden manipular en un modelo de tres columnas, con los sistemas también se pueden integrar o simular estrategias de control basadas en modelos de control predictivos (MPC) o también con controles integrados derivativos proporcional (PID), que mejoran al momento de controlar el bucle dentro de los sistemas, siendo la división de líquidos (βL) la variable manipulada, se logra implícitamente la minimización de energía. (Yu et al, 2015, pp. 3384-3390)

2.2. Bases Teóricas

2.2.1. Destilación

Las plantas químicas se pueden considerar como instalaciones en las cuales se convierte o transforma un conjunto de materias primas específicas en productos los cuales presentan características específicas con cierto interés industrial y también social. Esto ocurre a través de ciertos procesos de transformaciones físicas y/o químicas, en las cuales las operaciones destinadas a la separación se detallan las basadas en transferencia de masa, de los cuales se suelen distinguir de la siguiente manera:

- Los basados en diferencias de concentraciones en el equilibrio de dos fases
- Los fundamentados en diferencias de velocidades de transferencia de materia.

(Falceto, 2018, p. 5)

En el caso de equilibrio de dos fases, se tiene que dependiendo de cómo se genera la segunda fase, en este trabajo de investigación se tratara que para la generación de la segunda fase se aporta energía para conseguir la separación, al elemento que se añade para obtener una mezcla bifásica se lo conoce como agente separador, que puede ser tanto energético como másico en este caso se conoce como energético en el cual se utiliza aporte o extracción de calor, y el másico en el cual se utiliza ciclohexano como agente de arrastre o de separación, ya que genera la aparición de un nuevo azeótropo ternario heterogéneo deseable, ya que al principio el t-butanol se encuentra formando con el agua un azeótropo homogéneo el cual es muy difícil de separar y demanda el consumo excesivo

de energía. (Falceto, 2018, p. 5; Ollero, 2020)

Siendo la destilación un proceso físico que es usado para separar mezclas líquidas en sus componentes base, siempre que dos materiales, a cualquier temperatura presentan una marcada diferencia en sus presiones de vapor, siendo una base de separación de un compuesto, y si una o ambas sustancias se recuperaron por condensación mediante la diferencia de punto de ebullición presente mediante la aplicación o eliminación de calor el proceso se llama destilación. (Cheremisinoff, 2020; Ollero, 2020)

El proceso se basa en que el vapor de una mezcla hirviendo será o presentara mayor número de componentes que poseen los puntos de ebullición más bajos, por tanto cuando el vapor se enfría y se condensa, el condensado contendrá mayor número de componentes volátiles. Al mismo tiempo la mezcla inicial contendrá mayor material menos volátil, el equipo principal usado para el proceso de destilación son las columnas de destilación, que se diseñan con el objetivo de separar los componentes de una manera eficiente, se consideran algunas características que no deben obviarse en el punto de vista de diseño y fabricación:

- La destilación es la técnica de separación más usada y común a nivel industrial
- El consumo de energía es muy elevado, en especial en los intercambiadores de calor (condensadores y re hervidores)
- Llega a consumir más del 50% de la planta en función de los costos operativos (Cheremisinoff, 2020; Falceto, 2018, pp. 75)

Algunos métodos para la reducción de los costos operativos de las unidades de destilación es la mejora de su eficiencia y operación mediante la optimización y el control del proceso, dentro de estas mejoras se encuentra las columnas con acople térmico o columnas de pared divisoria (DWC), pero para alcanzar estas mejoras y estudios es necesario y esencial la comprensión profunda de los principios de destilación y como se diseña los sistemas de destilación. (Žarco et al, 2016; Martínez et al, 2013, p. 3)

2.2.1.1. Destilación Azeotrópica

Las ventajas de los procesos de destilación continua, realizados con métodos de destilación extractiva y destilación azeotrópica son utilizados con mayor frecuencia en la industria, los métodos basados son separación de mezclas azeotrópicas o mezclas altamente no ideales cuyos componentes presenten volatilidades muy próximas, en general la mayoría de estos procesos requieren la adición de un agente de arrastre o separación, que facilita la separación

del azeótropo ya sea debido a la aparición de un nuevo azeótropo de punto de ebullición extremo o bien por el cambio en las volatilidades relativas de los compuestos originales. (Cheremisinoff, 2000)

Esto dependerá de la propiedad física que modifique el agente separador, el cual se mezcla con la corriente en la columna, estos procesos generalmente necesitan una secuencia de dos o más columnas de destilación. (López, 2018, p. 3)

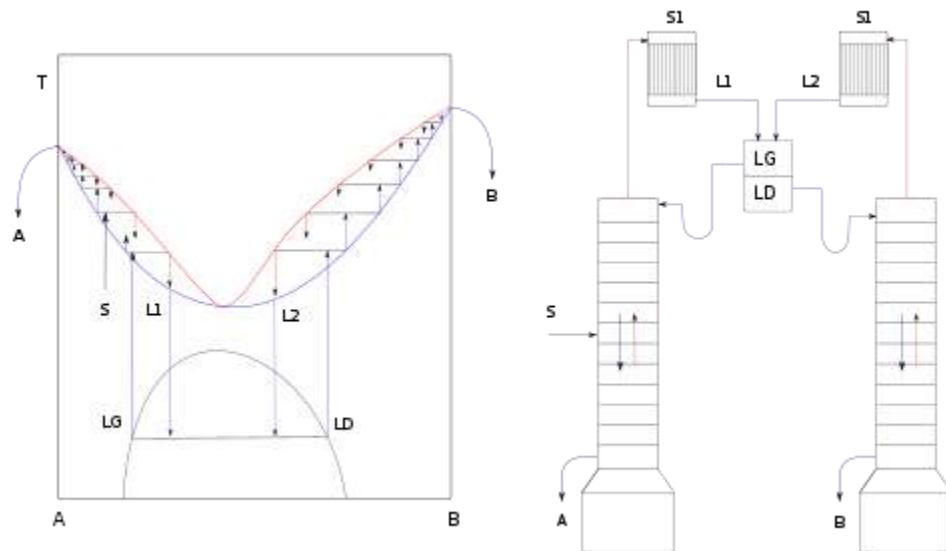


Figura 3-2. Diagrama de fase (a la izquierda) y proceso convencional de destilación azeotrópica, con el uso de un agente de arrastre o separación.

Fuente: (Cheremisinoff, 2000)

En la Figura 3-2., se puede observar un proceso y diagrama común de destilación azeotrópica, en la parte del diagrama se detalla zonas donde los componentes no son miscibles, por lo que al realizar la condensación del azeótropo, es posible su separación mediante el uso de decantadores. En la destilación azeotrópica heterogénea, es necesario la formación de un tercer componente el cual va a formar un azeótropo heterogéneo binario o ternario mediante el uso de un agente de separación adecuado, los vapores de cabeza de la columna los cuales se aproximan a la composición del azeótropo, al ser condensados se forman dos fases líquidas las cuales se separan mediante el uso de un decantador, la fase que es rica en disolvente se devuelve a la columna como reflujo y la otra pasa a una segunda columna para su posterior separación, estas fases normalmente quedan en diferentes regiones de destilación, sin tener restricciones como la destilación azeotrópica homogénea, al final los componentes a separar no quedarán necesariamente en la misma región de destilación. (Falceto, 2018, p.71; Ollero, 2020)

En las operaciones de destilación azeotrópica, se prefiere restringir la existencia de dos fases líquidas mediante el uso del decantador, con lo cual se evita la formación de dos fases líquidas en la cabeza de las columnas de destilación, la composición del vapor que abandona la cabeza de la columna será tal que el líquido en equilibrio quede fuera de la región heterogénea del azeótropo, cumpliendo las siguientes condiciones las composiciones de vapor:

- Existe la formación de dos fases líquidas en el condensado
- Se encuentran en equilibrio mediante una fase líquida homogénea

La conservación de las dos propiedades restringe la composición del vapor de cabeza de la columna de destilación azeotrópica a pequeñas regiones en el diagrama ternario. (Cheremisinoff, 2000; Falceto, 2018, p.73)

2.2.1.2. Azeótropos

Los azeótropos o mezclas azeotrópicas, son mezclas líquidas de dos o más componentes que tienen un mismo y único punto de ebullición, el cual es constante y fijo, al momento de pasar al estado gaseoso esta mezcla se comporta como un componente puro, es decir no existe diferenciación en su punto de ebullición, lo cual en la práctica de la vida diaria impide su destilación por vía convencional, en este proceso es necesario interpretar la diferencia de las composiciones entre las fases líquidas y de vapor. (Ezra, 1993, p. 2307; Disoluciones, 2021)

En el caso de la dependencia de la temperatura de ebullición se consideran dos aspectos, con respecto a los componentes puros de la mezcla los que son:

- Azeótropos de puntos de ebullición mínimo o también denominados azeótropo positivo, según la desviación positiva de la ley de Raoult
- Azeótropos de puntos de ebullición máxima los cuales se denominan azeótropos negativos, según la desviación negativa de la Ley de Raoult.

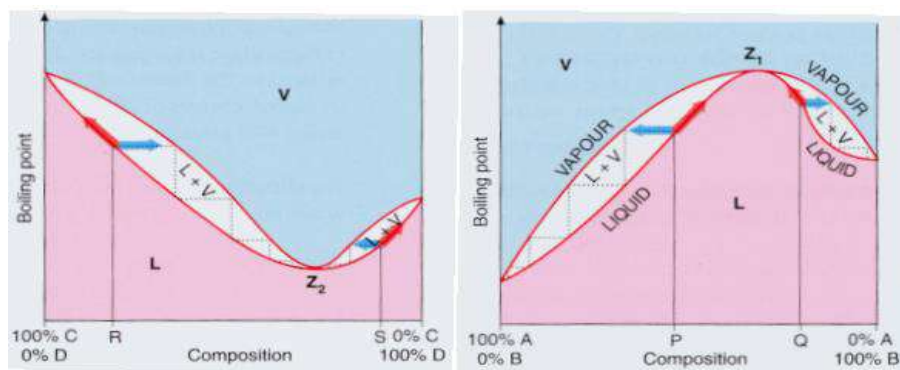


Figura 4-2. Equilibrio líquido- vapor en disoluciones no ideales (Azeótropos)

Fuente: (Disoluciones, 2021)

- **Desviaciones Positivas de la Ley de Raoult:** Aparece cuando las fuerzas intermoleculares respecto a los componentes son mucho más débiles que las existentes en los componentes puros por separado, lo cual representa a cada componente que se encuentra retenido en la mezcla, además su presión de vapor en la mezcla es mayor. (Disoluciones, 2021)
- **Desviaciones Negativas de la Ley de Raoult:** Aparece cuando las fuerzas intermoleculares respecto a los componentes son más fuertes que las existentes en los componentes puros por separado, lo cual representa a cada componente que se encuentra mayormente retenido en la mezcla, además su presión de vapor en la mezcla es menor. (Disoluciones, 2021)

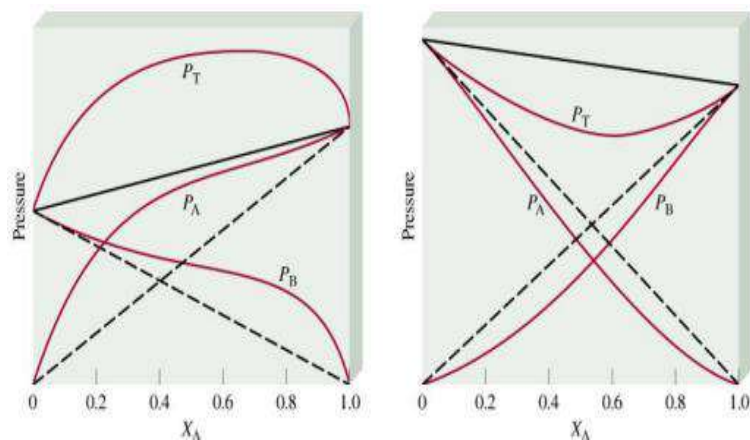


Figura 5-2. Desviaciones positivas y Negativas de la Ley de Raoult

Fuente: (Disoluciones, 2021)

Para lograr una correcta ruptura del azeótropo, se lo puede realizar mediante:

- **Métodos físicos:** en este caso se contempla la variación de la presión en su proceso de destilación, para lo cual tenemos, la destilación por oscilación de presión y la nueva tecnología de destilación de pared divisoria (DWC) los cuales logran separar el azeótropo. (Falceto, 2018, p. 75)
- **Métodos químicos:** los cuales son más comúnmente usados en las industrias, en el cual se añade un tercer componente, denominado agente de arrastre el cual se añade para modificar la interacción de las moléculas de ambos componentes a separar, lo que implica después la separación del mismo en el proceso. Algunos de los procesos son, la destilación azeotrópica extractiva heterogénea y la destilación extractiva, además se considera la destilación de pared divisoria azeotrópica que es una implementación nueva en el campo de la investigación. (Falceto, 2018, p. 76)

2.2.1.3. *Agente de Arrastre*

La selección del agente de arrastre, se basa en la capacidad que tiene la sustancia para modificar la volatilidad relativa dentro del proceso, pero al final se consideran más los costes de la sustancia a nivel industrial, sin embargo se deben analizar todas las variables y criterios posibles, considerando que las condiciones finales serán las que se analicen en el coste de inversión de capital y operación. (López, 2018, p. 6)

Para seleccionar un agente de separación se consideran los siguientes parámetros:

- **Selección de clases:** Los cuales pueden ser clasificados por su polaridad y la formación de enlaces de hidrogeno. (López, 2018, p. 3)
- **Selección de grupos químicos similares:** El entrainer (agente de arrastre) puede crear diferencias de polaridad entre los componentes de la alimentación, logrando usar los parámetros de solubilidad, en este caso en la destilación extractiva el agente de arrastre debe maximizar y minimizar la solubilidad de cada uno de los componentes de la mezcla según se necesite. (López, 2018, p. 3)
- **Propuestas útiles de agentes de arrastre:** La primera selección de los posibles entrainer se controla por diferentes factores como son los límites inferior y superior de puntos de ebullición, miscibilidad con los componentes de la mezcla, azeotropía entre el agente de arrastre y las otras sustancias, las reacciones que puedan ocurrir, etc. Considerando la heurística, aproximaciones empíricas y métodos numéricos que corroboren la efectividad del mismo en el proceso. (López, 2018, p. 3)

Los beneficios de los agentes de arrastre según su adecuada clasificación, dan las siguientes características:

- Alta selectividad del agente de arrastre
- Cambios en la volatilidad relativa
- Miscibilidad con los compuestos de la mezcla
- Mejor separación en los productos de destilado y residuo
- Separación de azeotropos dentro del proceso. (López, 2018, p. 3)

2.2.2. *Proceso Convencional de Dos Columnas*

Para un sistema convencional de dos columnas para la deshidratación de tert-Butanol, generalmente se selecciona como agente de arrastre al ciclohexano, teniendo la formación de

un azeótropo ternario heterogéneo, con tert-Butanol y agua en su proceso de separación industrial. Al agregar el agente de arrastre dentro del proceso se forma un azeótropo deseable, (t-butanol/ agua/ ciclohexano), el cual es heterogéneo con una temperatura azeotrópica de 65.2°C, siendo una temperatura mínima en todo el sistema ternario. (Yu et al., 2015, p. 3387)

En este proceso la alimentación fresca de tert-butanol y agua se alimenta a una columna 1 (C-1), la cual tiene como función la pre concentración de la mezcla, teniendo en el fondo de la columna agua de alta pureza y en el producto de cabeza el azeótropo binario formado, el cual se introduce a una columna 2 (C-2), en este caso la columna sirve como una columna de destilación azeotrópica heterogénea (HAD) de t-butanol, obteniendo como producto en la parte inferior o fondos al tert-butanol anhidro en un grado de alta pureza, y la corriente de cabeza con un azeótropo mínimo ternario (tert-butanol, agua y ciclohexano), en ebullición que es heterogéneo, el cual se condensa para formar una fase líquida que ingresaran a un decantador, el cual separara en dos fases, una fase orgánica la cual su principal componente es ciclohexano, la cual se recircula a la columna 2 (C-2) y la fase acuosa la cual se recircula al pre concentrador, que es la columna 1 (C-1). La economía del proceso, se considera en términos de costos de energía e inversión de capital. El modelo termodinámico usado en la simulación fue NRTL el cual describe la no idealidad del equilibrio liquido-vapor en el proceso. (Yu et al, 2015, p.388; Scenna et al, 2018)

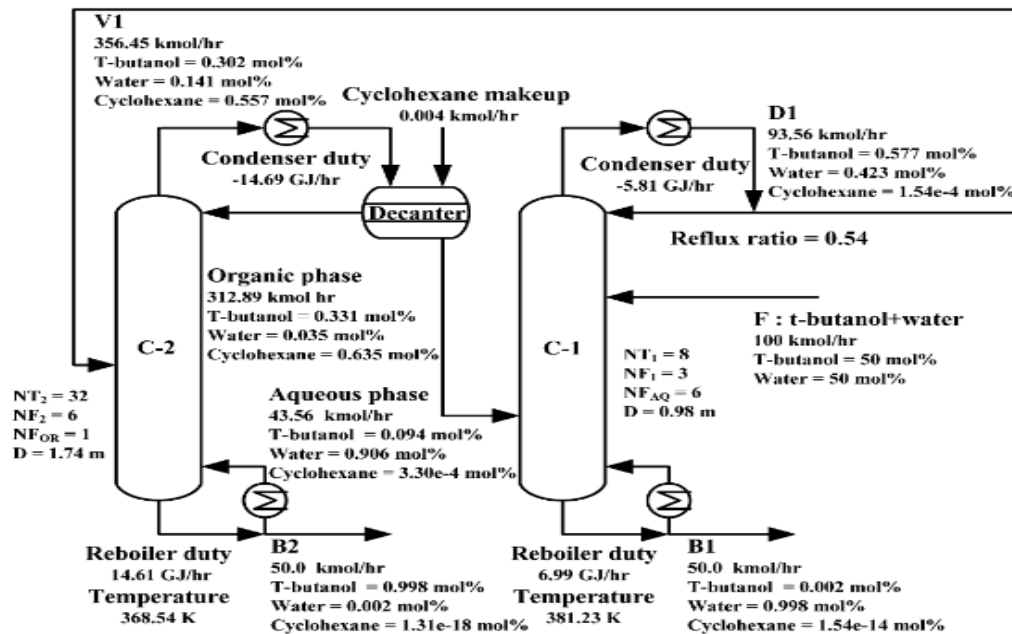


Figura 6-2. Proceso convencional de dos columnas para la deshidratación de tert-butanol

Fuente: (Yu et al, 2015, p. 3386)

Figura 7-2. Proceso de columnas de pared divisoria azeotrópica (A-DWC) para la deshidratación de tert-butanol

Fuente: (Yu et al, 2015, p. 3386)

Los tipos de columna usadas en la simulación, se describen a continuación:

- **Columna Pre-concentradora (C-1):** La columna concentradora tiene 6 etapas y con la alimentación fresca de ingreso en la tercera bandeja, y la fase acuosa en la cuarta bandeja, se debe considerar un parámetro muy importante, el cual es la relación de división líquida (β_L), ya que el consumo de energía en las calderas puede aumentar o disminuir con un rendimiento diferente, logrando satisfacer dos especificaciones el porcentaje de obtención de los productos y el consumo de energía de las calderas. (Yu et al, 2015, p. 3386)
- **Columna de destilación azeotrópica heterogénea (C-2):** La columna de destilación azeotrópica heterogénea (HAD), tiene un número de 31 etapas óptimas, las cuales cumplen con el proceso de la máxima obtención de tert-butanol anhidro, en esta parte se considera la relación de división líquida (β_L), siendo útil para mantener la pureza de los productos, debido a que la corriente líquida principal ingresa a la C-2, controlando este parámetro en rangos establecidos los productos se mantienen con alta pureza, en especial la separación de los azeótropos aumenta. (Yu et al, 2015, p. 3386)
- **Columna de Rectificación (C-3):** La columna de rectificación para que cumpla con el Coste Anual total (TAC) mínimo, se usa dos bandejas, las cuales nos ayudan en la separación de los componentes, siendo el eje esencial en el diseño de las columnas ya que funciona como el flujo principal en la alimentación del decantador, además de la relación de división líquida que ingresa a las columnas, controlando la pureza de los productos necesarios obtenidos, ya que en este punto se determina si el consumo de energía se reduce, además de que es la parte esencial para los puntos de bucles que se dan en el sistema. En la simulación se usa una de tipo absorción y separación, lo cual nos ayuda a la mezcla de un líquido con un gas sin perder sus propiedades en calidad de vapor, logrando separar las fases líquida y gaseosa, además de poder limpiar el agente de arrastre. (Absorption and Stripping, 2010; Yu et al, 2015, p. 3386)

2.2.3.1. *Tert-Butanol*

Butanoles, los butanoles se presentan en estado líquido a temperatura ambiente y su producción es muy demandada, en varios países industrializados el volumen de la producción de butanoles, tiende a ocupar el segundo lugar después del metanol, este alcohol presenta cuatro tipos de isómeros estructurales que tendrán su método de preparación específica dependiendo del tipo que se quiera sintetizar, en este caso el enfoque es en el tert-butanol. (Sanz, 2020)

El tert-butanol (t-butanol) o también llamado 2-metil-2-propanol es un alcohol terciario de fórmula condensada $C_4H_{10}O$, es uno de los 4 isómeros del butanol. El método industrial de obtención se asemeja al de la obtención de etanol e isopropanol, los cuales se realizan por métodos de hidratación en fase líquida, de los correspondientes alquenos, anteriores a su transformación, en presencia de agua y resinas de Intercambio Iónico. (Sanz, 2020)

El uso industrial de todos los butanoles, es como disolventes de lacas, resinas, barnices, plásticos, como anticongelantes y ésteres correspondientes, presentando una gama muy amplia en su proceso industrial. Específicamente su uso es como antidetonante para la gasolina y aditivo congelante. (Sanz, 2020)

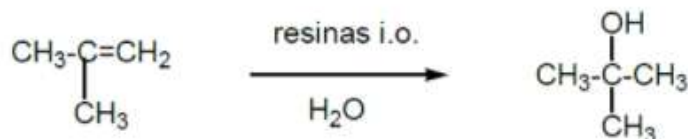



Figura 8-2. Proceso de Obtención del tert-butanol

Fuente: (Sanz, 2020)

El tert-butanol o también llamado 2-metil-2-propanol, carbinol trimetil es el único de los isómeros del butanol, capaz de mantenerse en estado sólido a temperatura ambiente, teniendo un punto de fusión por encima de los 25°C , es un líquido transparente o sólido incoloro, dependiendo de la temperatura ambiente, su olor es similar al alcanfor, es muy soluble en agua y miscible con etanol. Sus aplicaciones industriales varían, pero es usado ampliamente en el campo de los productos químicos y farmacéuticos, teniendo una gran demanda el anhídrido de tert-butanol, por eso es necesario el proceso de destilación. Además es usado como solvente, desnaturizante para etanol, como ingrediente en los removedores de pintura, como índice de octano de refuerzo y oxigenante aditivo para las gasolinas, y como producto intermediario en la síntesis de productos como Metil ter-butil éter (MTE), Éter etil tert-butílico (ETBE), Hidroperóxido de tert-butiro (TBHP), otros saborizantes y perfumes. A continuación se detallan algunas de las propiedades físico

químicas del tert-butanol. (Sanz, 2020; Colan, 2020)

Tabla 1-2. Propiedades físicas del tert-butanol.

Propiedad	Valor	Unidad
Número CAS	75-65-0	
Peso Molecular	74.12	g/mol
Densidad	775	kg/m ³
Punto de Fusión	25	°C
Punto de Ebullición	82	°C
Temperatura Crítica	506.21	°K
Factor Acéntrico	0.613	
Acidez	16.54	pKa
Fórmula Molecular	C ₄ H ₁₀ O	
Fórmula Desarrollada		
Límites de explosión	Inferior: 2.4 Superior: 8	% V/V

Realizado por: ROJAS R., 2021.

El tert-butanol a presión atmosférica (1atm), forma un azeótropo homogéneo indeseable con el agua. Este azeótropo contiene aproximadamente 12% en masa de agua y su temperatura de ebullición es de 79.9 °C, en la figura 5.2 se puede evidenciar el azeótropo formado en la mezcla, cabe recalcar que como se detalló antes el uso industrial del tert-butanol es anhidro por lo esencial del proceso para la separación del azeótropo mediante el uso de ciclohexano como agente de arrastre, para que se pueda formar un azeótropo heterogéneo, el cual su punto de ebullición disminuye a 65.2 °C. (Graczova et al, 2020)

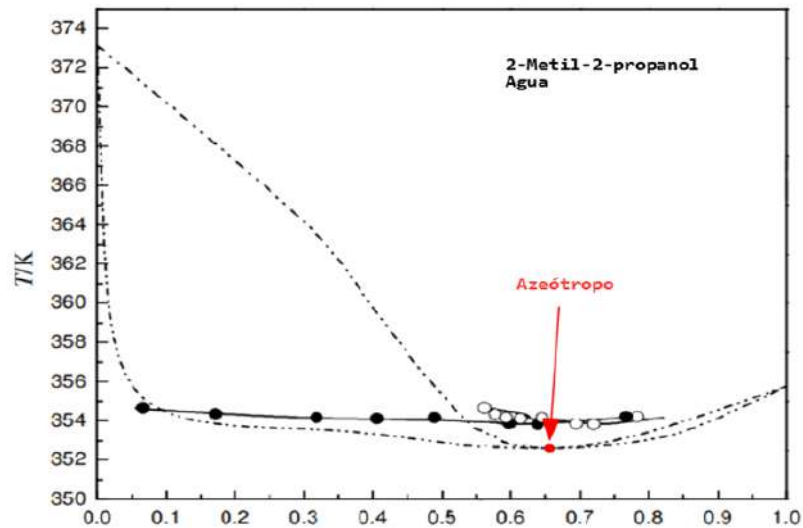


Figura 9-2. Azeótropo tert-butanol y agua

Fuente: (Hartanto et al, 2016)

2.2.4. DWSIM – Simulador de procesos químicos.

DWSIM es un simulador que posee una amplia interfaz gráfica de usuario, en donde se tiene la posibilidad de simular diferentes tipos de procesos químicos, los cuales se pueden replicar a nivel industrial, sin la necesidad de establecer plantas pilotos para determinar sus variables o modificar variables para aumentar su eficiencia, pues ya el programa lo realiza todo, siendo una manera económica de realizar plantas industriales y verificar su eficiencia en el campo de aplicación, DWSIM es un software gratuito y de fácil instalación el cual es de gran ayuda tanto para estudiantes como para profesionales en la industria, de la carrera de Ingeniería Química y carreras afines, mediante este programa será factible la simulación del proceso de deshidratación de tert-butanol mediante el proceso de columna de pared divisoria mediante destilación azeotrópica heterogénea, siendo una nueva investigación para su implementación y reducción de costos de operación, respecto a las columnas de destilación convencionales, con lo cual se podrá validar el proceso y determinar su eficiencia. (DWSIM, 2020)

DWSIM tiene dos interfaz graficas de usuario, una interfaz de usuario (IU) clásica y una interfaz de usuario (IU) multiplataforma, la IU clásica se basa en la biblioteca de clases grafica de Windows Forms, el cual ha sido utilizado desde las versiones iniciales de DWSIM. La biblioteca grafica de Windows Forms se creó para aplicaciones de Windows, al igual se tiene una biblioteca para Linux. (DWSIM, 2020)

- **Interfaz de Usuario Clásica (IU Clásica)**

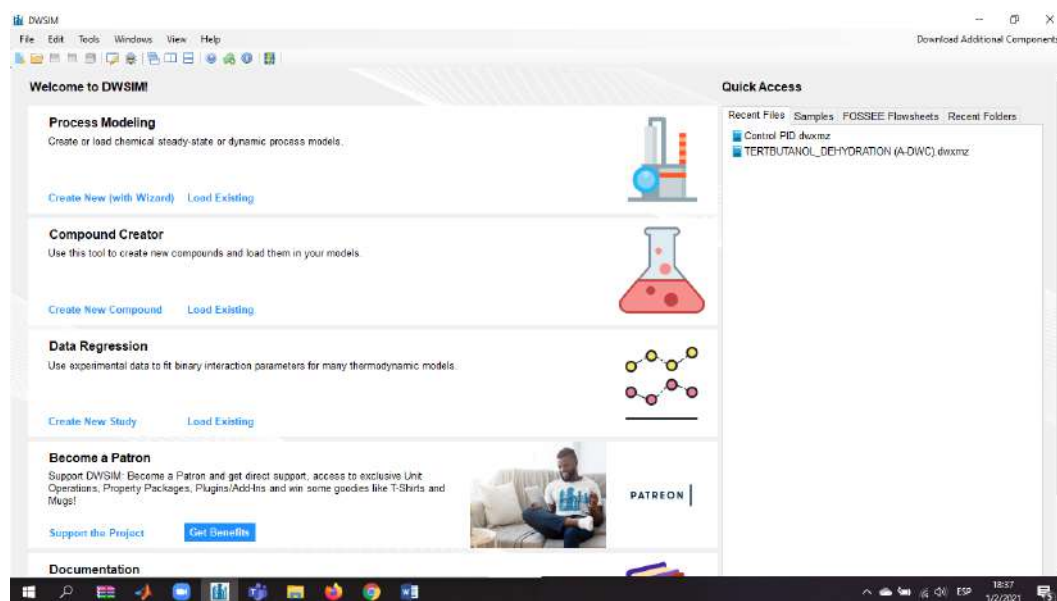


Figura 10-2. Pantalla de inicio de IU Clásica

Fuente: (DWSIM, 2020)

La pantalla de bienvenida proporciona al usuario accesos directos para abrir simulaciones existentes, crear nuevos compuestos y casos de regresión de datos, además de abrir la carpeta de muestras. Los siguientes elementos se muestran en la ventana principal de DWSIM:

- **Barra de Menú:** Con botones de abrir/guardar/crear simulaciones, regresión de datos, preferencias generales, herramientas, configuración del modo de vista. (DWSIM, 2020)

El botón "Crear una nueva simulación de estado estable", se puede usar para la creación de una nueva simulación, con la cual se abrirá una ventana de configuración, la cual consta con las siguientes ventanas:

- **Compuestos:** Para empezar una simulación es esencial referir como primer punto a los componentes o compuestos disponibles, DWSIM cuenta con seis bases de datos de compuestos predeterminados (DWSIM, ChemSep, Biodiesel, CoolProp, ChEDL y Electrolytes), con más de 1500 compuestos disponibles. Donde se puede ver detalladamente todas las propiedades del compuesto elegido, si no se tiene la herramienta PubChem donde se puede crear compuestos de acuerdo a las necesidades de la simulación. (DWSIM, 2020)

- **Base – Paquetes de Propiedad:** El paquete de propiedades consta con un conjunto de métodos y modelos para el cálculo de las propiedades físicas y químicas de los flujos de materiales en la simulación, el cual se encuentra compuesto por un modelo termodinámico, una ecuación de estado o un modelo híbrido y métodos para el cálculo de propiedades, como la tensión superficial de la fase líquida. (DWSIM, 2020)

2.2.4.1. Algoritmos Flash

Los algoritmos flash en DWSIM son los cuales determinan un conjunto particular de fases en equilibrio termodinámico, las cantidades de los compuestos en cada fase en las condiciones especificadas como temperatura, presión, entalpía y entropía total. Algunos de los algoritmos flash son capaces de predecir el equilibrio entre las fases de vapor y líquidas, algunos miden la fase líquida o sólida coexistente. Siendo la medida de cálculo la que aumente también aumentara las fases consideradas en equilibrio, el tiempo de cálculo y por ende la confiabilidad de los resultados disminuye. DWSIM presenta una selección de algoritmos flash que son capaces de calcular (VLE), (VLLE) y (SLE). (DWSIM, 2020; Medeiros, 2008)

- **Nested Loops (VLE):** Los bucles anidados son recomendados para la mayoría de sistemas de VLE (Vapor- Líquido en Equilibrio) (DWSIM, 2020; Medeiros, 2020)
- **Nested Loops (VLLE):** Bucles anidados se recomienda para sistemas donde la fase líquida puede ser inestables, el cual se divide en dos fases líquidas con diferentes composiciones. VLLE (Vapor- Líquido- Líquido en Equilibrio) (DWSIM, 2020)
- **Inside-Out (VLE/VLLE):** Recomendado para simulaciones de petróleo con muchos pseudocomponentes, la opción de 3 fases debe usarse cuando se espera una segunda fase líquida (es decir agua libre) (DWSIM, 2020)
- **Gibbs Minimization (VLE/VLLE):** Minimización de Gibbs es recomendado para sistemas químicos complejos. (DWSIM, 2020)
- **Nested Loops for Eutectic Solid Systems (SLE-E):** Lazos anidados para sistemas sólidos eutécticos, en este modelo se calcula los equilibrios sólidos-líquidos para sistemas eutécticos la cual considera las fases sólidas como ideales.

Se entiende por sistema eutéctico a las mezclas homogéneas de los sólidos que se encuentran íntimamente conectados, el cual forma una súper redícula, alcanzando un punto de fusión más bajo que el de los que poseen los compuestos individualmente. (DWSIM, 2020)

- **Nested Loops for Solid Solution Systems (SLE-SS):** Lazos anidados para sistemas de solución sólida, el cual calcula los equilibrios solido- líquido para sistemas de solución solida considerando la fase sólida como ideal. (DWSIM, 2020)
- **Nested Loops (3-phase immiscible VLLE):** Bucles anidados, VLLE trifásico inmiscible para los sistemas con una segunda fase liquida inmiscible. (DWSIM, 2020)

2.2.4.2. Paquetes Termodinámicos

La importancia de la correcta selección de las propiedades físicas de la mezcla en función de su temperatura y presión, ayuda a la correcta predicción, en donde cada método es adecuado solo para determinados tipos de componentes y está limitado a determinadas condiciones de funcionamiento. Siendo la elección del método incorrecto en la simulación la que genere resultados incorrectos o no ejecute la simulación, por esto se debe tener en cuenta y considerar que los cálculos al final sean confiables y asociados específicamente con la operación a utilizar (destilación, extracción, etc.) (Ali, 2015, p. 3)

Para seleccionar el modelo termodinámico se debe considerar:

- Elección del modelo o método más adecuado
- Comparar las predicciones obtenidas con datos de la literatura
- Agregar estimaciones para componentes que no están disponibles en el paquete térmico elegido
- Generación de datos de laboratorio si es necesario la verificación del modelo termodinámico. (Ali, 2015, p.3; Villanueva, 2010, p. 12)

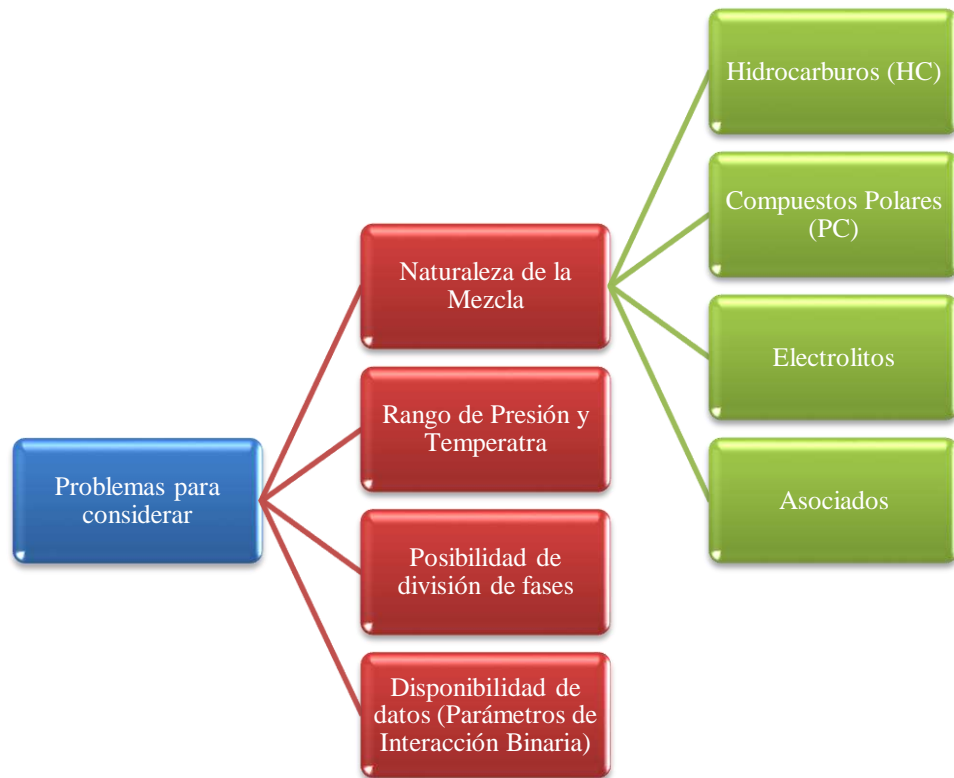


Figura 11-2. Problemas a considerar al momento de elegir un paquete termodinámico

Fuente: (Ali, 2015, p. 4)

Cualquier simulación de un proceso requiere disponer de las propiedades fisicoquímicas y termodinámicas de las mezclas de los compuestos en la simulación a realizar, en los distintos equipos del proceso, considerando las condiciones de composición, presión y temperatura. La adecuada selección de estos modelos termodinámicos es crucial para el cálculo preciso y exacto en cada equipo para determinar corrientes y propiedades de salida de los mismos, porque no es suficiente con que el simulador posea algoritmos complejos de cálculo, si la selección del método de predicción de propiedades es el incorrecto, teniendo a veces resultados los cuales tengan poco o nada de realidad. (Ali, 2015, p. 3; Villanueva, 2010, p.9)

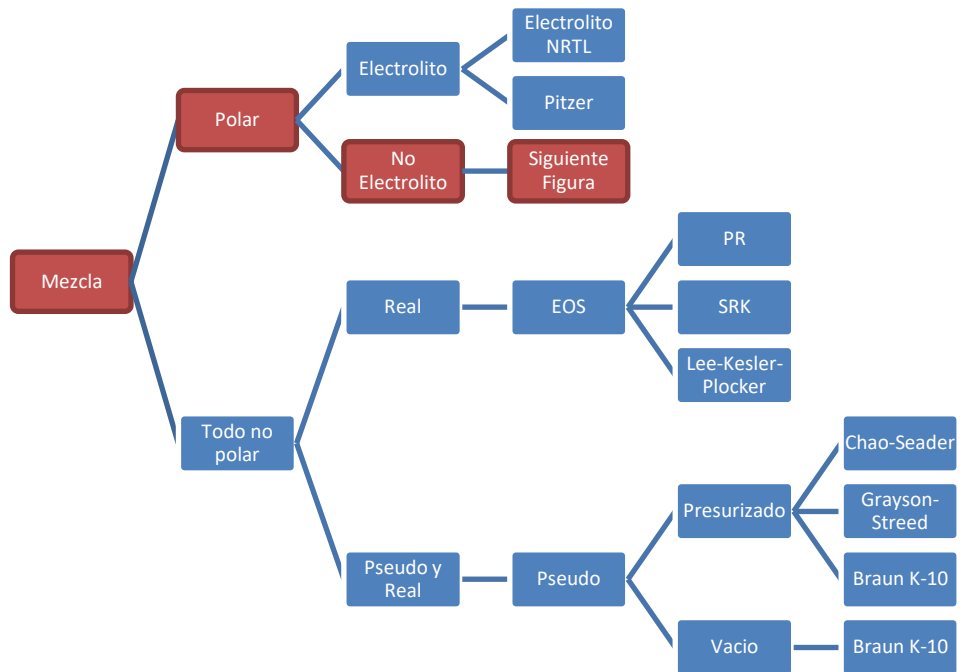


Figura 12-2. Elección del modelo termodinámico

Fuente: (Ali, 2015, p. 5)

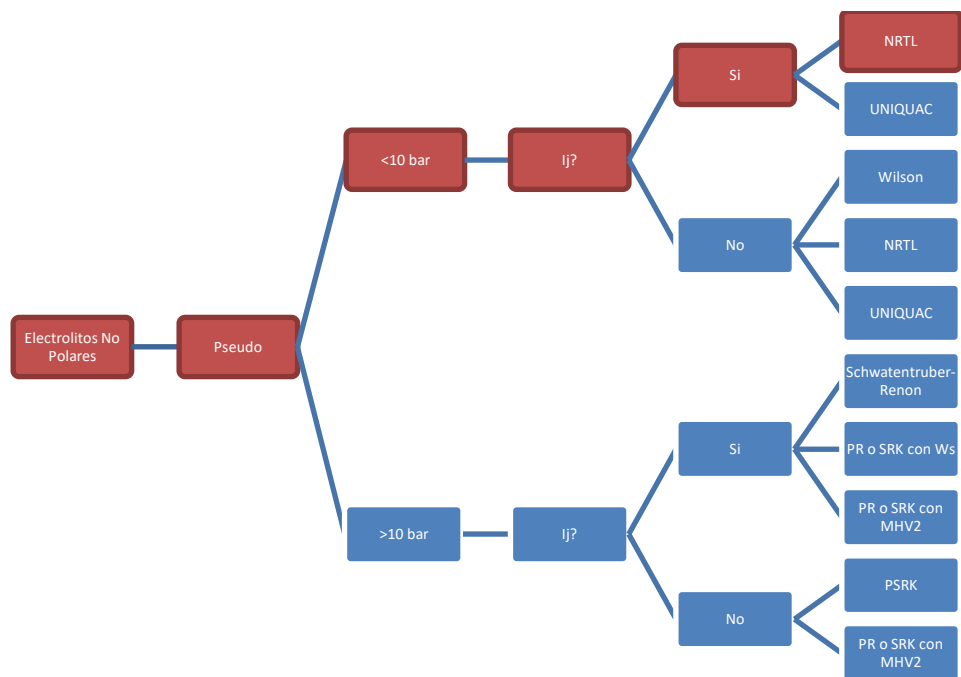


Figura 13-2. Elección del modelo termodinámico

Fuente: (Ali, 2015, p. 6)

La correcta elección de los modelos termodinámicos permite el cálculo de las propiedades termodinámicas y equilibrios de fase que sirven para resolver balances de materia y energía en los equipos de la simulación realizada, y de igual manera con su dimensionado.

(Villanueva, 2010, p.15)

En este caso además de considerar el modelo termodinámico global de un sistema ternario se escogió es el NRTL (Modelo no aleatorio de dos líquidos) porque es un modelo el cual describe la no idealidad del equilibrio vapor-liquido. Los puntos azeotrópicos y las composiciones calculados por el modelo termodinámico son lo bastante aproximados a las mediciones experimentales. (Yu et al, 2015, p. 3387)

- **Modelo NRTL:** Predice el equilibrio líquido-líquido, aunque tiene tendencia a establecer falsas separaciones de fases, siendo capaz de representar el comportamiento de LV, LL, LLV. Es muy preciso con modelos en sistemas agua/ compuestos orgánicos, siendo su extensión a mezclas multicomponentes directa. (Ali, 2015, p. 7; Villanueva, 2010, p.21)
- **UNIQUAC (Universal Quasi-Chemical):** Presenta las mismas características básicas que NRTL pero requiere un menor volumen de datos de parámetros de interacción, siendo capaz de predecir los equilibrios, siendo usado en la predicción de equilibrio de sistemas altamente no ideales. Los parámetros experimentales exhiben una escasa dependencia con la temperatura favoreciendo el método de extrapolación del método. (Ali, 2015, p. 7; Villanueva, 2010, p.21)

2.2.4.3. Modelos de operación de la unidad de simulación de procesos







“El modelado y la simulación de procesos químicos pueden usarse como una herramienta de diseño en el desarrollo de plantas químicas, y se utilizan como un medio para evaluar diferentes opciones de diseño y variables. Los estándares de interfaz CAPE-OPEN se desarrollaron para permitir la implementación y utilización de componentes de modelado de procesos en cualquier entorno de modelado de procesos compatible.” (DWSIM, 2020)



“Los estándares CAPE-OPEN son estándares uniformes para la interfaz de componentes de software de modelado de procesos desarrollados específicamente para el diseño y operación de procesos químicos. Los estándares CAPE-OPEN son abiertos, multiplataforma, uniformes y están disponibles de forma gratuita. Se describen en un conjunto de documentación formal.” (DWSIM, 2020)

“Las operaciones de la unidad CAPE-OPEN se pueden agregar a los diagramas de flujo DWSIM y conectarse a/desde las corrientes de energía y material al igual que las

operaciones normales de la unidad DWSIM. DWSIM también implementa las interfaces de reacción CAPE-OPEN para que pueda usar su modelo de reactor CAPE-OPEN junto con DWSIM y gestionar sus reacciones utilizando el administrador de reacciones como de costumbre.” (DWSIM, 2020)

Tabla 2-2. Operaciones usadas en la simulación en DWSIM

Operación Unitaria	Descripción	Símbolo
Corriente de Materia	Usado para representar la materia que entra y sale de los límites de la simulación y pasa por las operaciones unitarias, en donde se debe definir sus condiciones y composición para que DWSIM calcule sus propiedades en consecuencia.	
Corriente de Energía	Usado para la representación de la energía que entra y sale de los límites de la simulación y pasa a través de las operaciones unitarias	
Mezclador	Se utiliza para mezclar hasta tres flujos de material en uno, mientras se calculan y ejecutan los equilibrios de masa y energía	
Divisor de Corriente	Operación de la unidad de balance de masa, divide una corriente de material en otras dos o tres	
Separador de Componentes	Modelo para simular un proceso genérico de separación de componentes	
Intercambiador de Calor	Operación que está a la cabeza o fondo de las columnas de destilación, como condensador o hervidor	

CAPE-OPEN Unidad de Operación	Toma de operaciones de la unidad CAPE-OPEN externa para agregar operaciones de la unidad de Columnas de Destilación en DWSIM	
Además, la siguiente operación lógica usada en la simulación		
Reciclar	Se utiliza para mezclar material de corriente abajo, con material de corriente arriba en los diagramas de flujo, o para poder llevar a cabo los bucles formados en las simulaciones.	

Fuente: DWSIM simulador (DWSIM, 2020).

Realizado por: ROJAS R., 2021.

2.3. Marco Legal

2.3.1. Normativa Ecuatoriana

Tabla 3-2. Normativa sobre software libre

Normativa	Observaciones
Decreto N. 1040 (Abril 2008)	<p>Art. 2.- Se conoce por softwares libres, aquellos programas de computación los cuales se pueden usar y distribuir sin restricciones, con el libre acceso a los códigos de fuente y pueden aplicarse mejoras al programa.</p> <p>Se basa en los siguientes ejes:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Cumplimiento de recomendaciones Internacionales: 2. Con los objetivos fundamentales de: <ul style="list-style-type: none"> • Alcanzar la soberanía y autonomía tecnológica • Alcanzar un ahorro en recursos públicos <p>Estos programas computacionales tienen las</p>

	<p>siguientes características:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Uso del programa con cualquier finalidad • Distribución de copias sin restricciones • Modificación y mejoramiento de variables • Publicación de las mejoras realizadas (Gobierno del Ecuador, 2008)
<p>Código Orgánico de Economía Social de los Conocimientos, Creatividad e Innovación (2016)</p>	<p>De las tecnologías libres y formatos abiertos</p> <ul style="list-style-type: none"> • Art. 142.- Tecnologías Libres: Se conoce por tecnologías libres al software de código, estándares abiertos, contenidos y hardware libre, otorgando a los usuarios la libertad sin restricción de uso, los datos almacenados en formatos de estándares abiertos no requieren de la autorización para poder ser utilizados, estos formatos podrían o no ser aprobados por entidades de certificación internacionales. • Art. 144.- El uso de las tecnologías digitales libres en los sistemas de educación, no obstante las instituciones del Sistema de Educación Superior no están obligadas al uso exclusivo de tecnología digitales libres en la cátedra y en la investigación, pero se garantiza una enseñanza holística de soluciones informáticas independientemente la licencia. • Art. 151.- Libre elección de software: Los usuarios tienen derecho a la libre elección del software en dispositivos que lo permitan. (Asamblea Nacional del Ecuador, 2016)
<p>Constitución de la República del</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Tecnología y producción:

<p>Ecuador (2008)</p>	<p>En la constitución se garantiza la soberanía nacional, además de definir los sectores estratégicos los cuales se destacan las tecnologías como hardware y software, garantizando el acceso a las tecnologías, capacitación, desarrollo e integración regional.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Título II Derechos. Sección tercera: Comunicación e Información. <p>Art. 16, numeral 2. “Garantizar el derecho al acceso universal a las tecnologías de información y comunicación.</p> <ul style="list-style-type: none"> • ”Título VI Régimen de desarrollo. Capítulo Sexto: Trabajo y producción. Sección primera Formas de organización de la producción y su gestión. Art. 334, numeral 3. “Impulsar y apoyar el desarrollo y la difusión de conocimientos y tecnologías orientados a los procesos de producción. • ”Título VII Régimen de buen vivir. Capítulo primero Inclusión y equidad. Sección Octava. Ciencia, tecnología, innovación y saberes ancestrales. Art. 385, numeral 3 “Desarrollar tecnologías e innovaciones que impulsen la producción nacional, eleven la eficiencia y productividad, mejoren la calidad de vida y contribuyan a la realización del buen vivir” (Lexis, 2008) • Plan Nacional de Seguridad Integral: <p>Se aclara y se extiende el concepto de</p>
------------------------------	---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

	<p>Soberanía Tecnológica y Ciencia en distintos ámbitos.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Plan Nacional del Buen Vivir (PNBV): <p>Como parte de la Planificación Nacional, el PNBV contempla las “Tecnologías, innovación y conocimiento” como parte de sus estrategias, y además plantea 12 objetivos con sus políticas que sirven de guía. El Objetivo 10, se refiere a “Impulsar la transformación de la matriz productiva” y su política 10.3 reviste especial importancia que puede aplicarse en la generación de una industria local de software libre, con ayuda de inversión pública</p>
<p>Plan Nacional de Gobierno Electrónico (2015)</p>	<p>Se basa en la Carta Iberoamericana de Gobierno electrónico del año 2007, se han formulado 12 principios los cuales precautelan el derecho de los ciudadanos con el Estado electrónicamente. En el principio 7 se dice que: “La adecuación tecnológica” se recomienda que el uso de estándares abiertos y de software libre con base de la seguridad, sostenibilidad a largo plazo y la socialización del conocimiento. (Gobierno Electrónico, 2015)</p>

Fuente: Varios.

Realizado por: ROJAS R., 2021.

2.3.2. Normativa Internacional

De acuerdo a la licencia de DWSIM en su página web, se detalla que la normativa en la que se basa el software es: la licencia tipo LGPL (Licencia Pública General Reducida de GNU), la cual es una licencia gratuita publicada por Free Software Foundation, siendo una alternativa permisible que las licencias pagadas, destinada a garantizar la libertad para compartir y modificar las versiones de un programa asegurando la gratuidad del mismo. (DWSIM, 2020)

CAPITULO III

3. METODOLOGÍA

3.1. Etapas de la Metodología

En el presente trabajo de titulación se busca el desarrollo de un proceso de deshidratación de tert-butanol utilizando un proceso de columna de pared divisoria mediante destilación azeotrópica heterogénea, con lo cual se quiere validar y comparar con el proceso de deshidratación convencional, se describirá la simulación detalladamente, debido a que anteriormente se realizó una revisión bibliográfica, a continuación se describe las siguientes etapas:

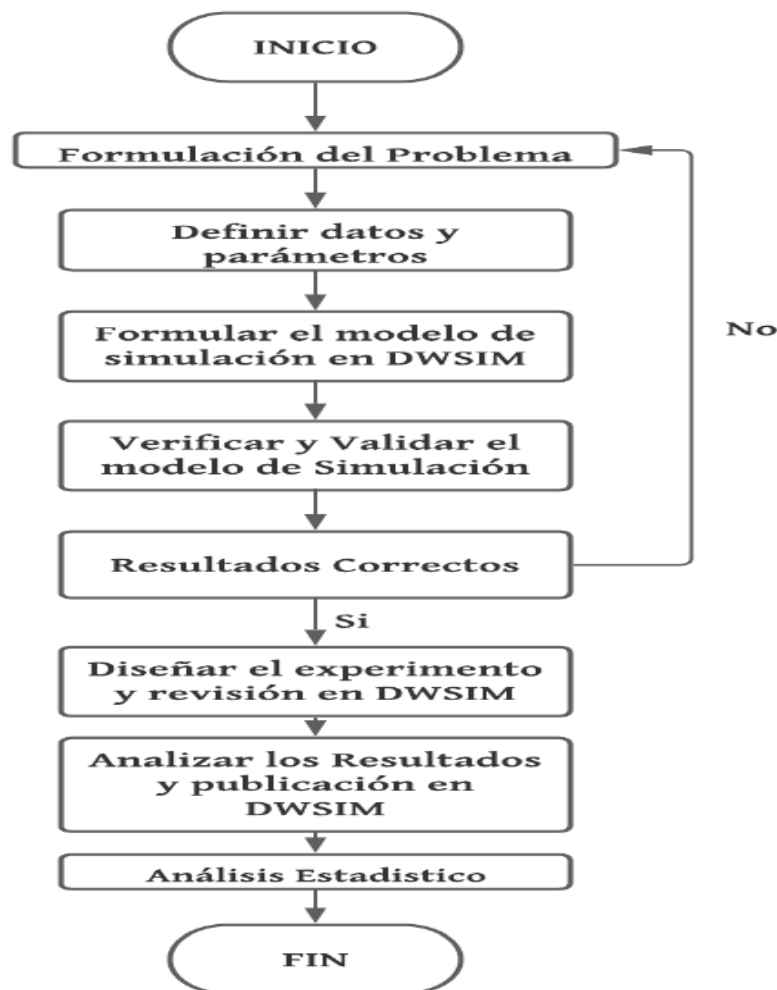


Figura 1-3. Etapas de la metodología
Realizado por: ROJAS R., 2021.

En la figura 1-3, se detalla el procedimiento empleado paso a paso para el diseño y validación de la simulación en DWSIM. Las etapas de la metodología del proceso son las siguientes:

- **Formulación del Problema:** La principal problemática es el consumo excesivo de energía de las columnas de destilación azeotrópicas convencionales para la deshidratación de tert-butanol, buscando la mejor solución con columnas de pared divisoria azeotrópica (A-DWC), buscando minimizar el consumo de energía, además de la invención de nueva tecnología en el campo de la destilación.
- **Definición datos y parámetros:** En este punto es importante colocar los datos de entrada que se especifican en el diagrama de procesos, mostrado en la figura 2-3., logrando detallar composiciones, flujos másicos, composiciones, modelos termodinámicos, entre otros como las columnas de destilación de CAPE OPEN, la relación de división de líquido (βL), que son parámetros esenciales en la simulación de A-DWC.
- **Formulación del modelo de simulación en DWSIM:** Respecto a toda la información de los datos y parámetros, se siguió con el modelado del flowsheet en DWSIM, con la finalidad de que la simulación calcule todos los valores necesarios para determinar su validez respecto a la fuente bibliográfica, se consideran conocimientos previos en simulación para poder analizar el proceso.
- **Verificar y validar el modelo de simulación:** Los resultados obtenidos se compararan con la fuente bibliográfica, con lo cual se pretende llegar a los mismos resultados en un software gratuito como es DWSIM.
- **Resultados Correctos:** Con los resultados correctos se pretende proseguir con la validación del proceso de deshidratación, para esto se simula el proceso en DWSIM y se verifica en la bibliografía los valores obtenidos.
- **Diseñar el experimento y revisión en DWSIM:** Se diseña la simulación y se envía a la página de DWSIM para que se validen los resultados obtenidos con el artículo científico, para así poder tener la verificación por parte de DWSIM que nos ayudara en el proceso químico, para determinar cuan factible es, respecto al método convencional.

- **Analizar los resultados y publicar en DWSIM:** Luego de la revisión y verificación de los resultados, se solicita la publicación y redacción de la simulación en DWSIM, con esto se puede tener constancia de la validez del proceso teniendo una mejora en el mismo.
- **Análisis estadístico:** Se aplica el test ANOVA con los resultados del simulador respecto a los resultados del artículo científico.

3.1.1. Parámetros de Funcionamiento

La información necesaria para llevar a cabo el proceso de simulación en DWSIM, se lo obtuvo del artículo científico titulado: Design and Control of Dividing-Wall Column for tert-Butanol Dehydration System via Heterogeneous Azeotropic Distillation, el cual fue escrito por Hao Yu, Qing Ye, Hong Xu, Hao Zhang and Xin Dai en el año 2015 de Jiangsu Key Laboratory of Advanced Catalytic Materials and technology, Institute of Petrochemical Engineering, Changzhou University, Changzhou, Jiangsu 212164, China.

3.1.2. Diagrama de flujo de procesos (PFD)

En el trabajo de titulación definiremos como primer punto el diagrama de flujos de proceso, el cual viene en el artículo científico (Yu et al, 2015), donde se describe varios de los parámetros de la (A-DWC), se muestra en la figura 2-3., el cual es una simulación en ASPEN HYSIS, teniendo 3 columnas de destilación, 1 condensador y 2 reboiler, y un decantador, los cuales serán explicados su proceso y utilidad dentro de la simulación en DWSIM.

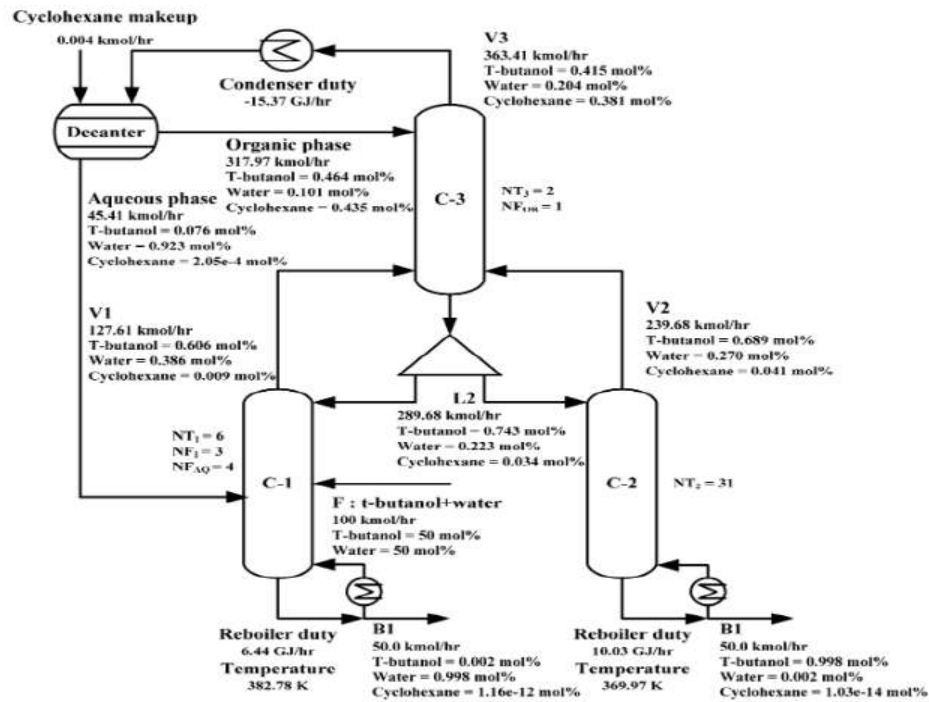


Figura 2-3. Diagrama de proceso de separación de tert-butanol y agua por medio de columnas de pared divisoria azeotrópicas (A-DWC). (Yu et al, 2015)
Realizado por: ROJAS R., 2021.

3.1.3. Parámetros del proceso a simular

Con los parámetros de funcionamiento definidos y considerando de donde se obtuvo la información, se describen en este apartado las entradas y salidas, además de las operaciones utilizadas en la simulación, para validar la simulación, se utilizaron los mismos datos. A continuación se presentan algunas tablas de los parámetros utilizados en el simulador:

3.1.3.1. Generales

Tabla 1-3. Parámetros generales de la simulación.

Parámetros	Valores
Componentes	Tert-butanol, Agua, Ciclohexano
Modelo termodinámico general	NRTL
Algoritmo flash	Nested Loops VLE

Realizado por: ROJAS R., 2021.

3.1.3.2. Columna de Destilación Azeotrópica (C-1)

Tabla 2-3. Condiciones (C-1)

Parámetros	Valores			Unidades
Composición de la alimentación. (F).	tert- butanol	Agua		<i>%mol</i>
	50	50		
Flujo molar de la alimentación (F).	100 (27.77 mol/s)			<i>kmol/h</i>
Flujo molar de la fase Acuosa (AQ).	45.41 (12.6139mol/s)			<i>kmol/h</i>
Composición de la fase acuosa (AQ).	tert- butanol	Agua	Ciclohexano	<i>%mol</i>
	0.076	0.923	2.05e-4	
Número de platos (NT₁).	6			
Plato de alimentación NF₁)	3			
Plato de alimentación fase acusa (NF_{AQ})	4			
Diámetro de columna	1.62			<i>M</i>
Presión operativa	101325			<i>Pa</i>
Caída de presión por plato	0.0068			<i>Atm</i>
Temperatura del flujo de entrada (T_F)	30 (303.15 K)			<i>° C</i>
Calor Reboiler	6.44			<i>GJ/h</i>
Temperatura	382.78			<i>K</i>
Entrada a la columna a partir del divisor de corriente (LI)	32.17 (8.9361 mol/s)			<i>kmol/h</i>
Composición de entrada a la columna a partir del divisor de corriente (LI)	tert- butanol	Agua	Ciclohexano	<i>%mol</i>
	0.743	0.223	0.034	
Flujo molar de fondo (BI)	50 (13.8889 mol/s)			<i>kmol/h</i>
Composición del Flujo de fondo (BI)	tert- butanol	Agua	Ciclohexano	<i>%mol</i>
	0.002	0.998	1.16e-12	
Flujo molar de cabeza de destilado (VI)	127.61 (35.4472 mol/s)			<i>kmol/h</i>
Composición de cabeza	tert-	Agua	Ciclohexano	<i>%mol</i>

<i>de destilado (VI)</i>	butanol			
	0.606	0.386	0.009	
<i>Calidad de Vapor en la cabeza de destilado (VI)</i>	1			(Solo vapor)

Realizado por: ROJAS R., 2021.

Tabla 3-3. Características de simulación de la columna azeotrópica (C-1) en CAPE-OPEN

Variable	Nombre
Configuración (Columna en Equilibrio)	
Operación	Destilación Azeotrópica
Condensador	Ninguno
Reboiler	Parcial (Producto Líquido)
Modelos Termodinámicos	
Valor-k	DECHEMA
Ecuación de estado	Ley del gas ideal
Coefficiente de Actividad	UNIFAC
Presión de Vapor	Antoine
Entalpia	Ideal
Opciones de Resolución (Opciones Numéricas)	
Inicio	Resultados Antiguos
Método	Método de Newton
Numero de Iteraciones	30

Realizado por: ROJAS R., 2021.

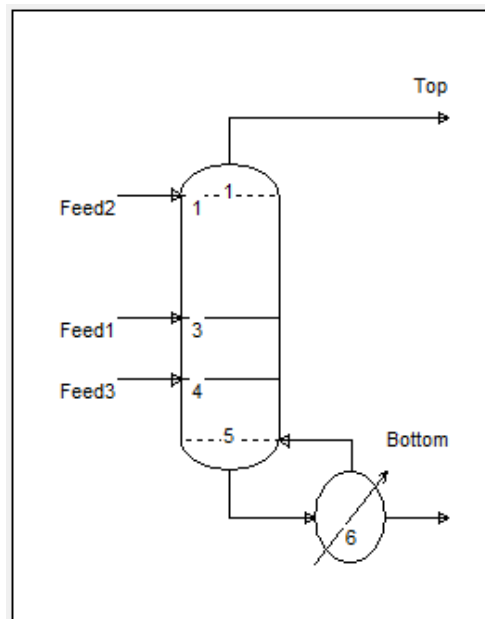


Figura 3-3. Columna azeotrópica C-1

Realizado por: ROJAS R., 2021.

3.1.3.3. Columna de Destilación Azeotrópica (C- 2)

Tabla 4-3. Condiciones (C-2)

Parámetros	Valores			Unidades
Flujo de Entrada (L₂).	289.68 (89.4028 mol/s)			<i>kmol/h</i>
Composición del flujo de entrada (L₂)	tert-butanol	Agua	Ciclohexano	<i>%mol</i>
	0.743	0.223	0.034	
Número de platos (NT₂).	31			
Plato de alimentación (NF₂)	1			
Diámetro de columna	1.62			<i>M</i>
Presión operativa	101325			<i>Pa</i>
Caída de presión por plato	0.0068			<i>Atm</i>
Temperatura del flujo de entrada (T_F)	80.3421 (353.492 K)			° C
Calor Reboiler	10.03			<i>GJ/h</i>
Temperatura	369.97			<i>K</i>
Flujo molar de fondo (B1)	50 (13.8889 mol/s)			<i>kmol/h</i>
Composición del Flujo de fondo (B1)	tert-butanol	Agua	Ciclohexano	<i>%mol</i>
	0.998	0.002	1.03e-14	
Flujo molar de cabeza de destilado (V2)	239.68 (66.577 mol/s)			<i>kmol/h</i>
Composición de cabeza de destilado (V2)	tert-butanol	Agua	Ciclohexano	<i>%mol</i>
	0.689	0.270	0.041	
Calidad de Vapor en la cabeza de Destilado (V2)	1			(Solo vapor)

Realizado por: ROJAS R., 2021.

Tabla 5-3. Características de simulación de la columna azeotrópica (C-2) en CAPE-OPEN

Variable	Nombre
Configuración (Columna en Equilibrio)	

Operación	Destilación Azeotrópica
Condensador	Ninguno
Reboiler	Parcial (Producto Líquido)
Modelos Termodinámicos	
Valor-k	DECHEMA
Ecuación de estado	Ley del gas ideal
Coefficiente de Actividad	UNIFAC
Presión de Vapor	Antoine
Entalpia	Ideal
Opciones de Resolución (Opciones Numéricas)	
Inicio	Resultados Antiguos
Método	Método de Newton
Numero de Iteraciones	30

Realizado por: ROJAS R., 2021.

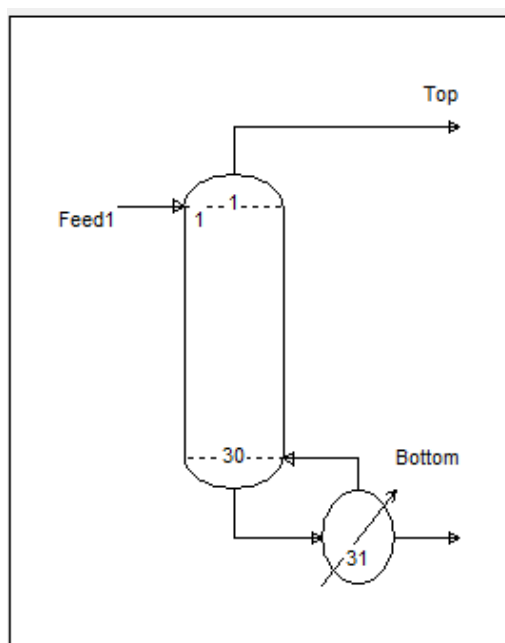


Figura 4-3. Columna azeotrópica C-2

Realizado por: ROJAS R., 2021.

3.1.3.4. Columna de Rectificación Indivisa (C-3)

Tabla 6-3. Condiciones de Rectificación (C-3)

Parámetros	Valores			Unidades
Flujo de Entrada de la Fase Orgánica (OR)	317.97 (88.325 mol/s)			kmol/h
Composición del flujo	tert-	Agua	Ciclohexano	%mol

de entrada de la Fase Orgánica (OR)	butanol			
	0.464	0.101	0.435	
Número de platos (NT₃)	2			
Plato de alimentación (NF₃)	2			
Plato de alimentación de la Fase Orgánica (NF_{OR})	1			
Presión operativa	101325			Pa
Temperatura del flujo de entrada (T_{FOR})	39.0831 (312.233 K)			° C
Calor Condensador	-15.37			GJ/h
Flujo molar de fondo (B1)	50 (13.8889 mol/s)			kmol/h
Composición del Flujo de fondo (B1)	tert-butanol	Agua	Ciclohexano	%mol
	0.998	0.002	1.03e-14	
Flujo molar de cabeza de destilado (V3)	363.41(100.947 mol/s)			kmol/h
Composición de cabeza de destilado (V3)	tert-butanol	Agua	Ciclohexano	%mol
	0.415	0.204	0.381	
Calidad de Vapor en la cabeza de destilado (V3)	1			(Solo vapor)

Realizado por: ROJAS R., 2021.

Tabla 7-3. Características de simulación de la columna azeotrópica (C-2) en CAPE-OPEN

Variable	Nombre
Configuración (Columna en Equilibrio)	
Operación	Simple Absorber/Stripper
Condensador	Ninguno
Reboiler	Ninguno
Modelos Termodinámicos	
Valor-k	DECHEMA
Ecuación de estado	Ley del gas ideal
Coefficiente de Actividad	Modified UNIFAC (D)
Presión de Vapor	Antoine
Entalpia	Excess

Opciones de Resolución (Opciones Numéricas)	
Inicio	Resultados Antiguos
Método	Método de Newton
Numero de Iteraciones	30

Realizado por: ROJAS R., 2021.

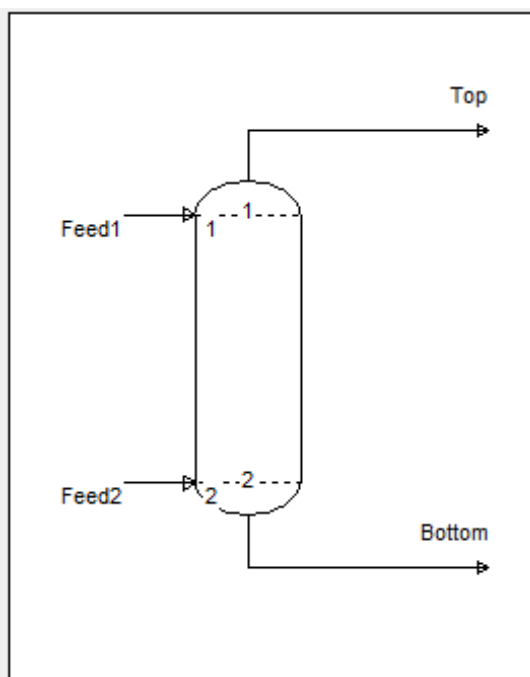


Figura 5-3. Columna azeotrópica C-3

Realizado por: ROJAS R., 2021.

3.1.3.5. Decantador y Divisor de Corriente

Tabla 8-3. Condiciones de Operación Decantador

Parámetros	Valores	Unidades
Flujo de entrada (Ciclohexano make-up)	0.004 (0.001111 mol/s)	kmol/h
Salida de la Fase Orgánica (OR)	317.97 (88.325 mol/s)	kmol/h
Salida de la Fase Orgánica (AQ)	45.41 (12.6139 mol/s)	kmol/h

Realizado por: ROJAS R., 2021.

Tabla 9-3. Condiciones de Operación Decantador

Parámetros	Valores	Unidades
Relación de división líquida (β_L)	0.90	Relación de L2/L (Valor óptimo)

Realizado por: ROJAS R., 2021.

3.2. Simulación en DWSIM

En esta sección se consideran las tablas de los parámetros del proceso a simular en la sección anterior, teniendo los parámetros establecidos y descritos para poder realizar la simulación de deshidratación de tert-butanol a partir de columnas de pared divisoria, en el simulador gráfico DWSIM.

3.2.1. Procedimiento para realizar la simulación

En la figura 6-3., se muestra el proceso para el diseño de la simulación en DWSIM.

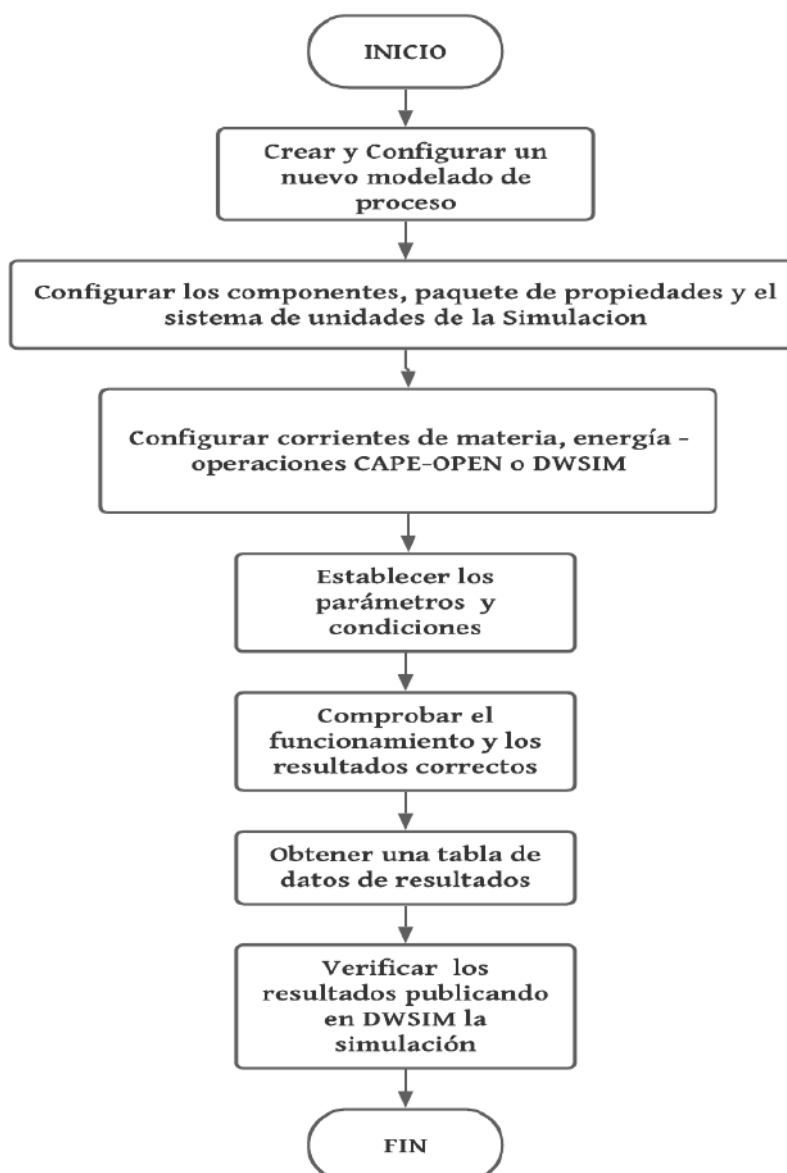


Figura 6-3. Procedimiento para simular en DWSIM.
Realizado por: ROJAS R., 2021.

3.2.1.1. Crear y configurar un nuevo modelado de proceso- Configuración de variables

Como primer paso en el proceso de simulación en DWSIM, se inicia con el programa DWSIM seleccionando crear y configurar un nuevo modelo, donde como primer punto se tiene una introducción, después seleccionar el o los compuestos químicos a utilizar en la simulación, en este caso se escogió tert-butanol, agua y ciclohexano como agente de arrastre, un dato importante es que si no se tiene el compuesto en la librería DWSIM, permite la creación del compuesto o la mezcla de los mismos mediante ChemSep, después se elige los paquetes de propiedades global del sistema, en la programación dependerá mucho de la sustancia a usar y los parámetros a medir, por último se establece un lineamiento respecto al sistema de unidades con el que trabajara globalmente la simulación.

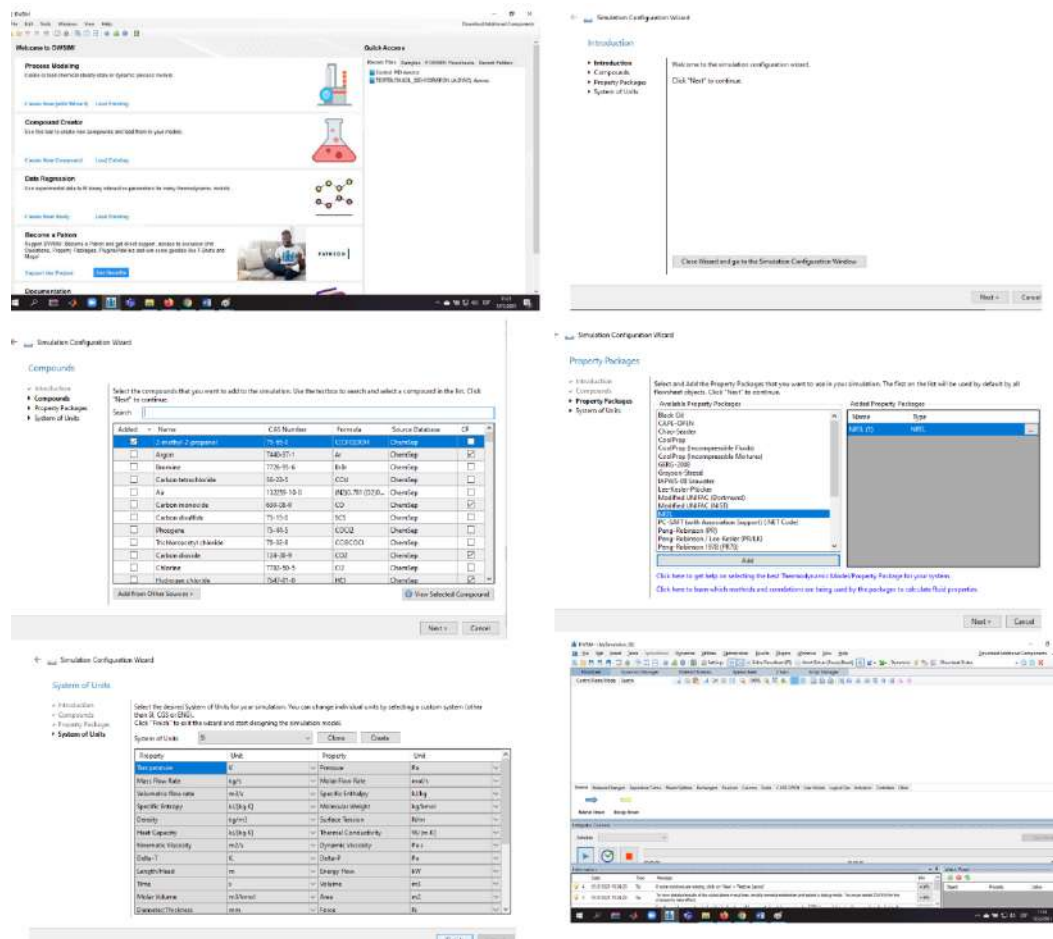


Figura 7-3. Pantallas de acceso y creación de una nueva simulación en DWSIM

Realizado por: ROJAS R., 2021.

3.2.1.2. Configurar corrientes y operaciones – Establecer parámetros y condiciones

En este apartado se considera los datos del apartado 3.1.3 donde se detallan los parámetros y condiciones de la simulación, además de que en la simulación se utilizaron 3 columnas de destilación, la cuales se describen en el mismo apartado, se usaron 17 corrientes de materia en las entradas y salidas de la simulación, 2 mezcladores, 1 tanque separador de componentes como decantador, 1 divisor de corriente y por último se usaron 2 operadores lógicos, en este caso se usó un bloque de reciclaje, con el cual se permitió que al momento de la formación del bucle en la simulación el programa pudiera calcular todos los parámetros, limitando sus variables y cálculos para que el ciclo sea convertido en finito y cuente con un cálculo final.

- **Flujo de Materia**

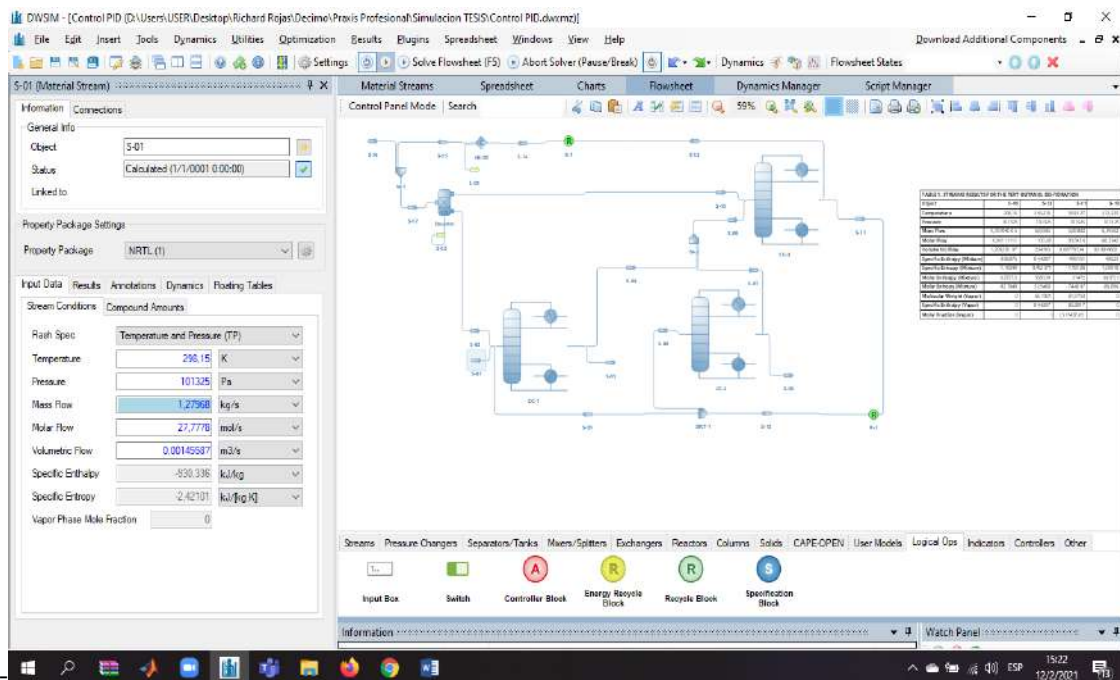


Figura 8-3. Configuración en los flujos de materia
 Realizado por: ROJAS R., 2021.

- **CAPE OPEN C-1**

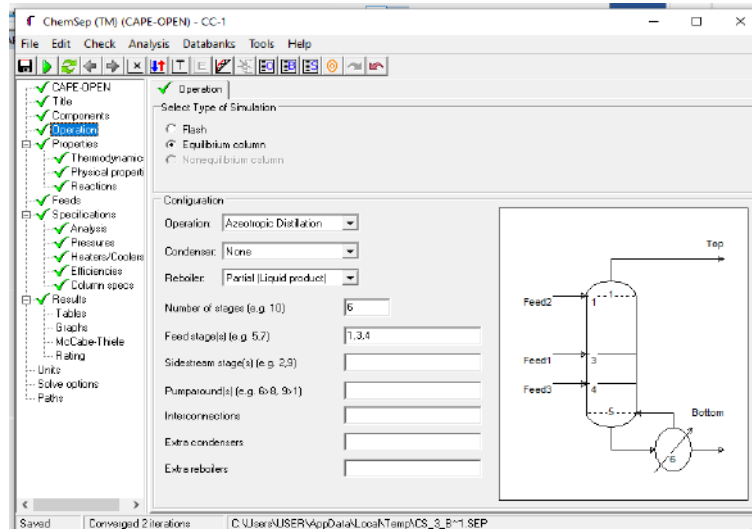


Figura 9-3. Configuración en CAPE-OPEN para C-1
Realizado por: ROJAS R., 2021.

- **CAPE OPEN C-2**

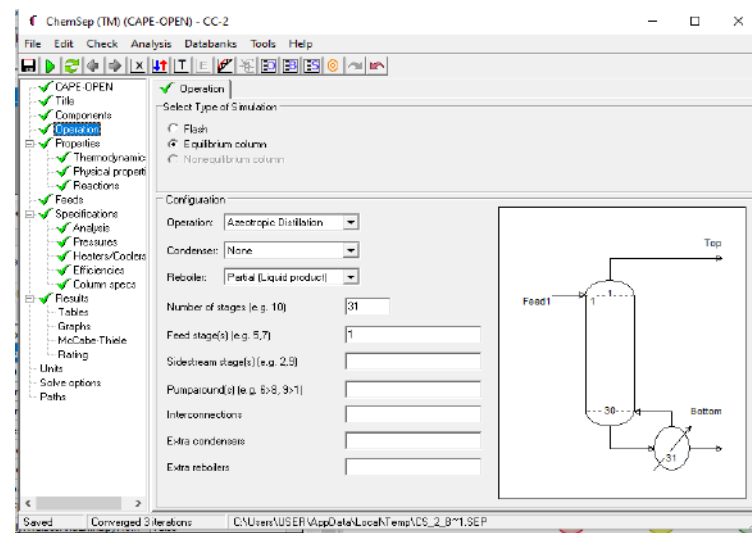


Figura 10-3. Configuración en CAPE-OPEN para C-2
Realizado por: ROJAS R., 2021.

- **CAPE OPEN C-3**

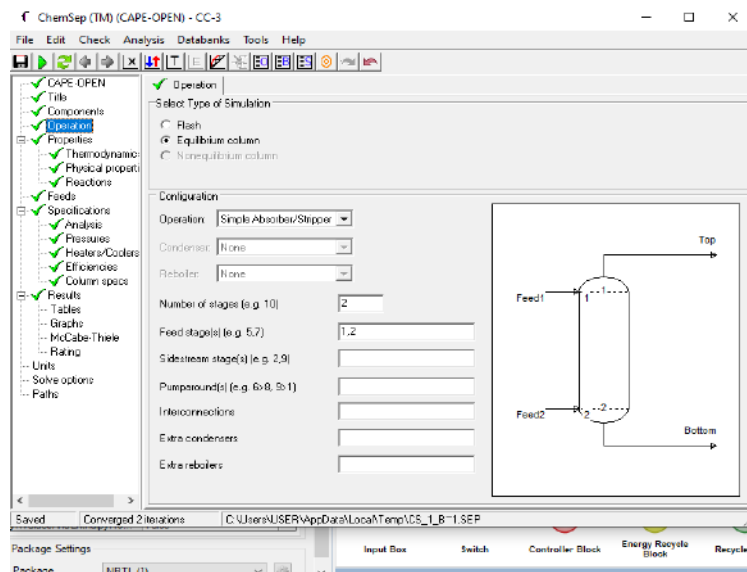


Figura 11-3. Configuración en CAPE-OPEN para C-3
Realizado por: ROJAS R., 2021.

- **Mezclador**

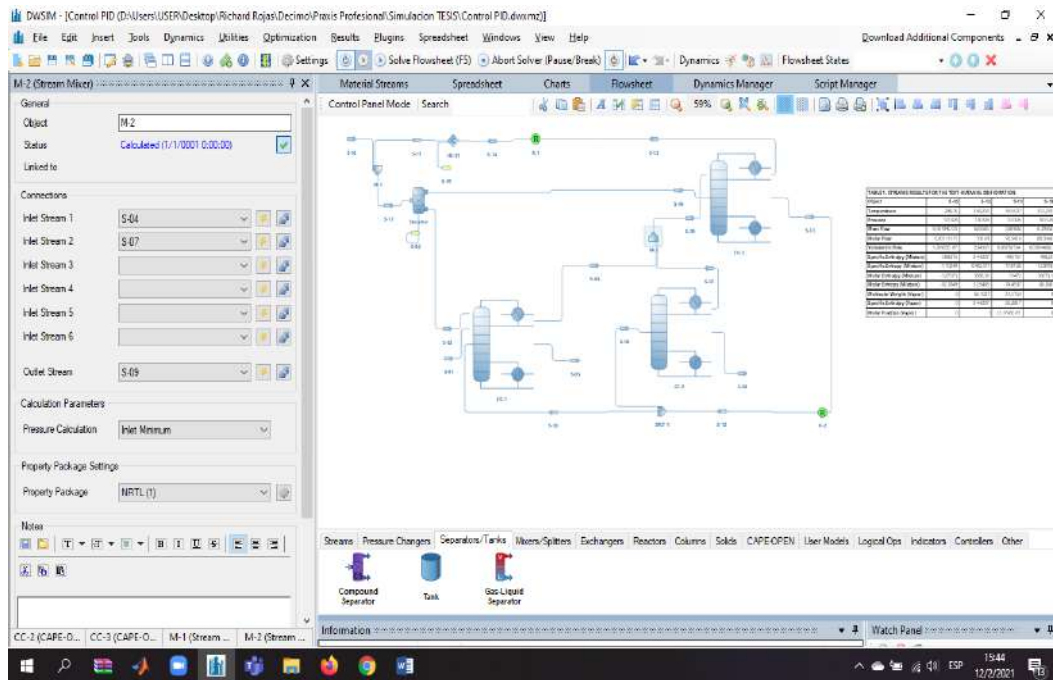


Figura 12-3. Configuración para el mezclador
Realizado por: ROJAS R., 2021.

- **Divisor de Corriente**

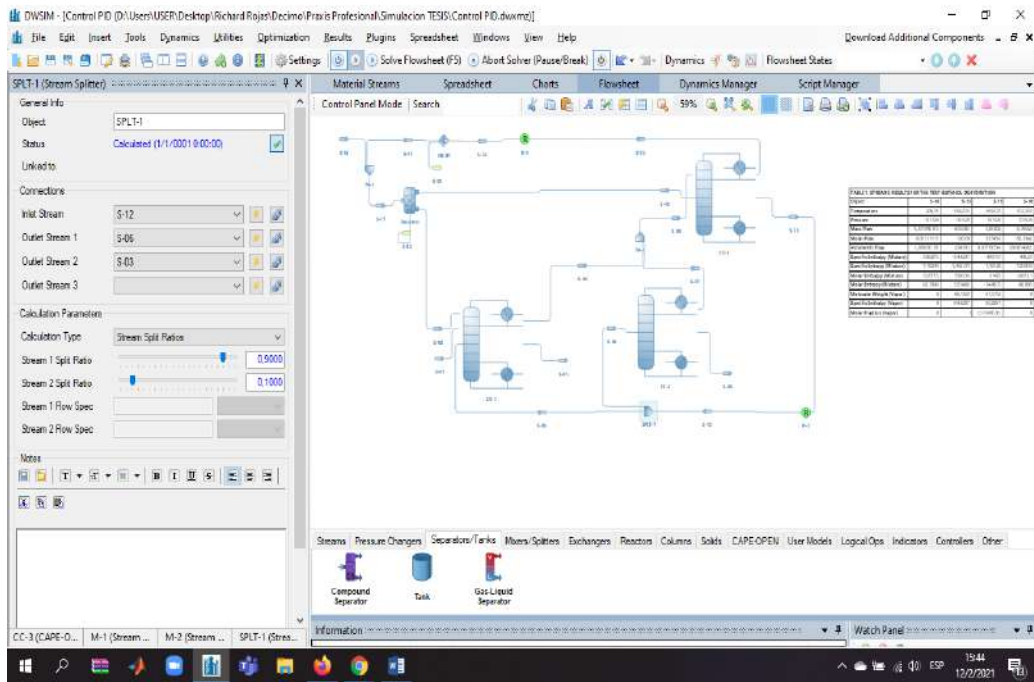


Figura 13-3. Configuración para el divisor de corriente
Realizado por: ROJAS R., 2021.

- **Bloque de Reciclar**

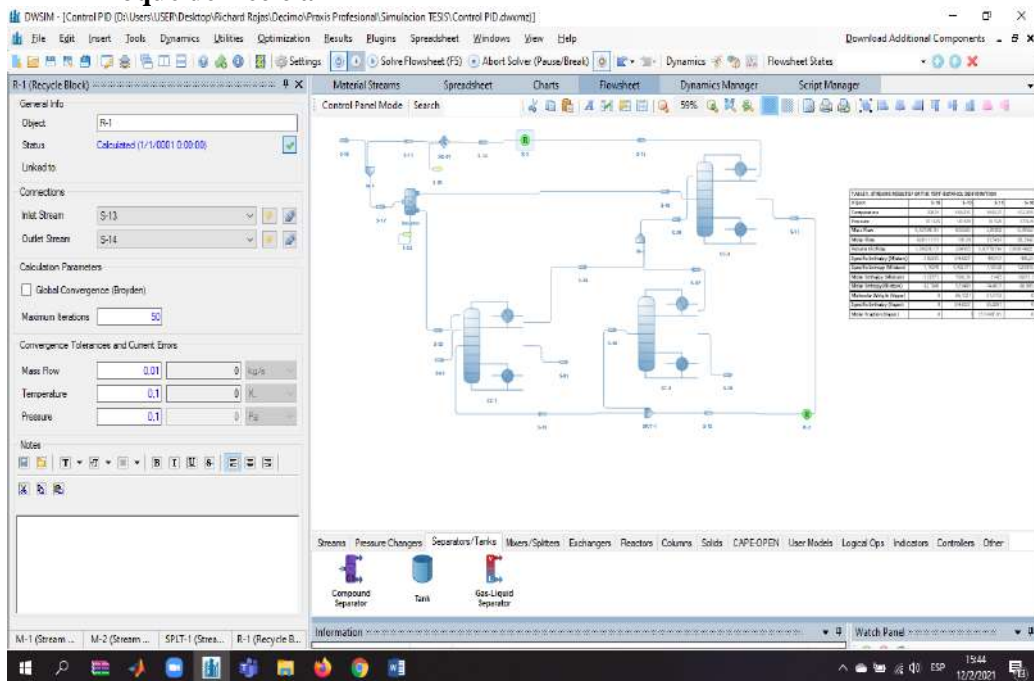


Figura 14-3. Configuración para el recycle block
Realizado por: ROJAS R., 2021.

- **Separador de Componentes**

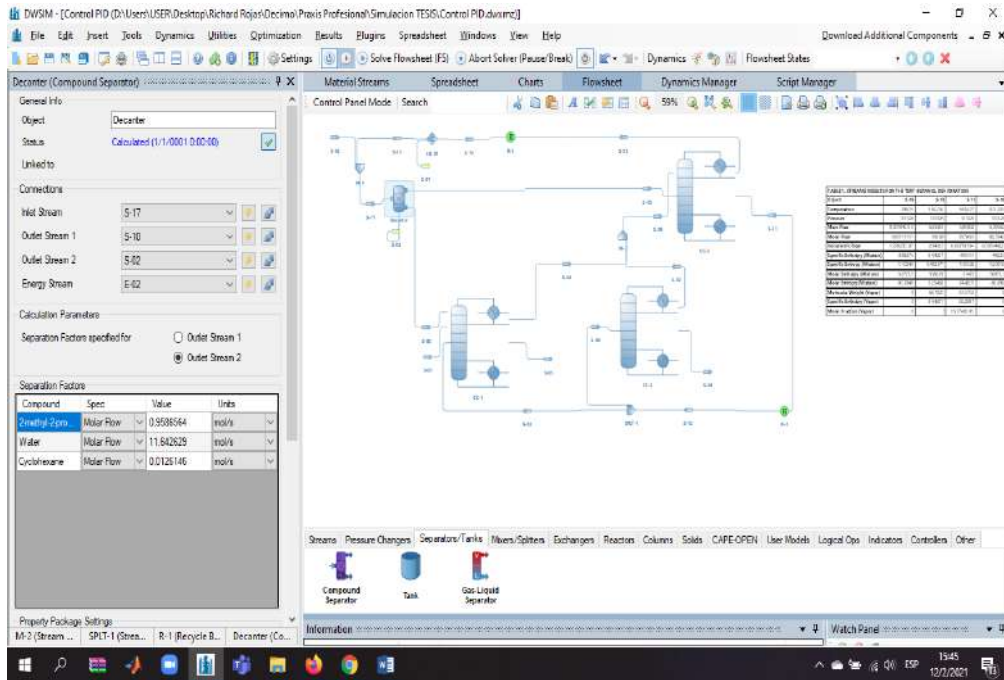


Figura 15-3. Configuración para el separador de componentes
Realizado por: ROJAS R., 2021.

- **Condensador**

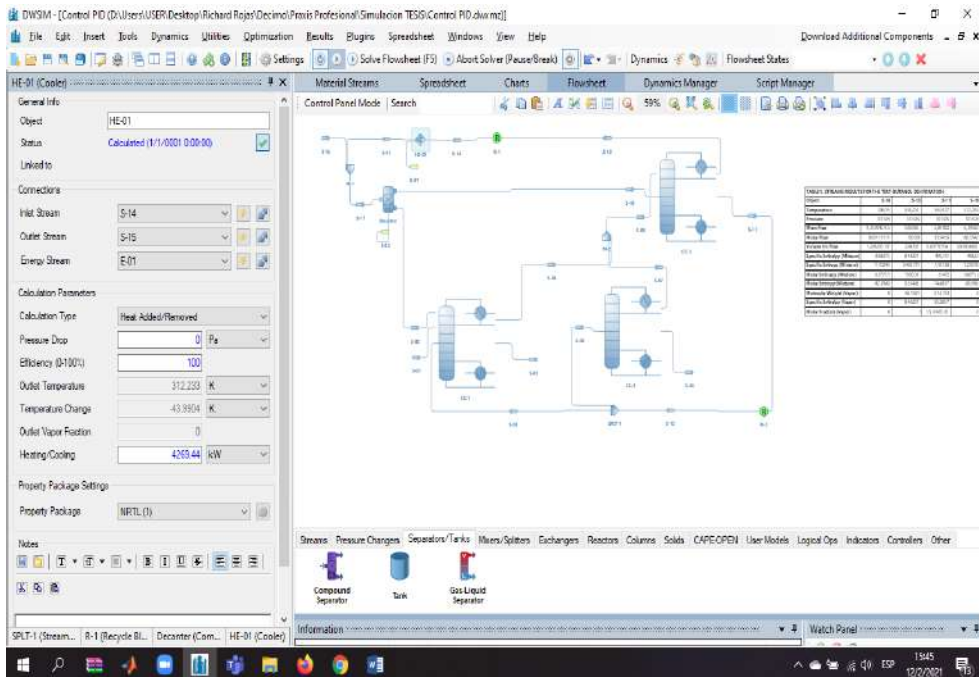


Figura 16-3. Configuración para el condensador
Realizado por: ROJAS R., 2021.

3.2.1.3. Comprobar el funcionamiento y los resultados

El funcionamiento de la simulación, se lo considera respecto a los resultados obtenidos, ya que hasta llegar a la simulación correcta se variaron parámetros, hasta llegar a los establecidos en

tablas, de los cuales es importante destacar que las columnas de destilación, presentaron ciertas variaciones debido a su finalidad de operación, además de que se considera ciertas relaciones en masa o composiciones molares, logrando de esa manera obtener los resultados finales como lo son: fracciones molares de cada uno de los componentes, los cuales deben ser similares para poder validar la simulación, flujos, temperaturas, presiones, con lo cual se logra la comparación de los valores obtenidos con los valores de la simulación, a fin de dar validez al sistema en un software libre como DWSIM. (Véase en la sección de resultados).

Además de que en la figura 17-3., se puede ver que el software DWSIM permite insertar tabla de resultados, con las diferentes propiedades de interés para cada sección del proceso o para el proceso en general, las cuales son de funcionamiento o las calculadas al ejecutar la simulación.

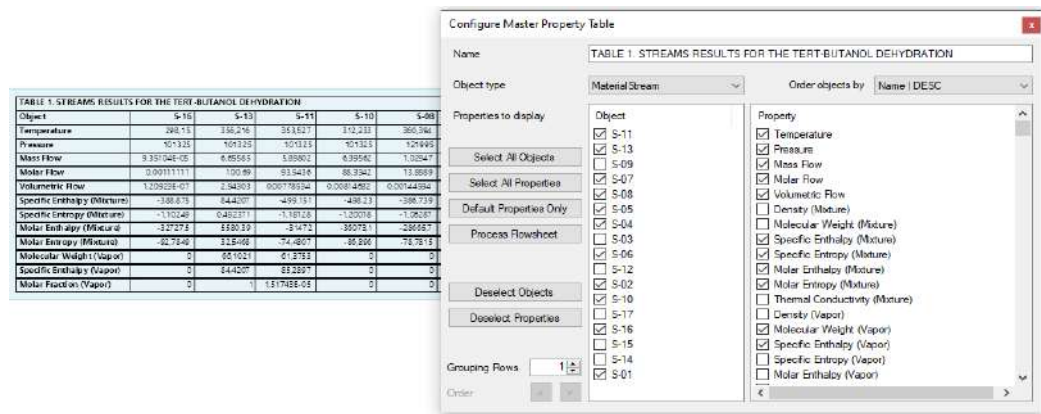


Figura 17-3. Propiedades y Resultados en DWSIM
Realizado por: ROJAS R., 2021.

3.2.1.4. Diagrama de proceso

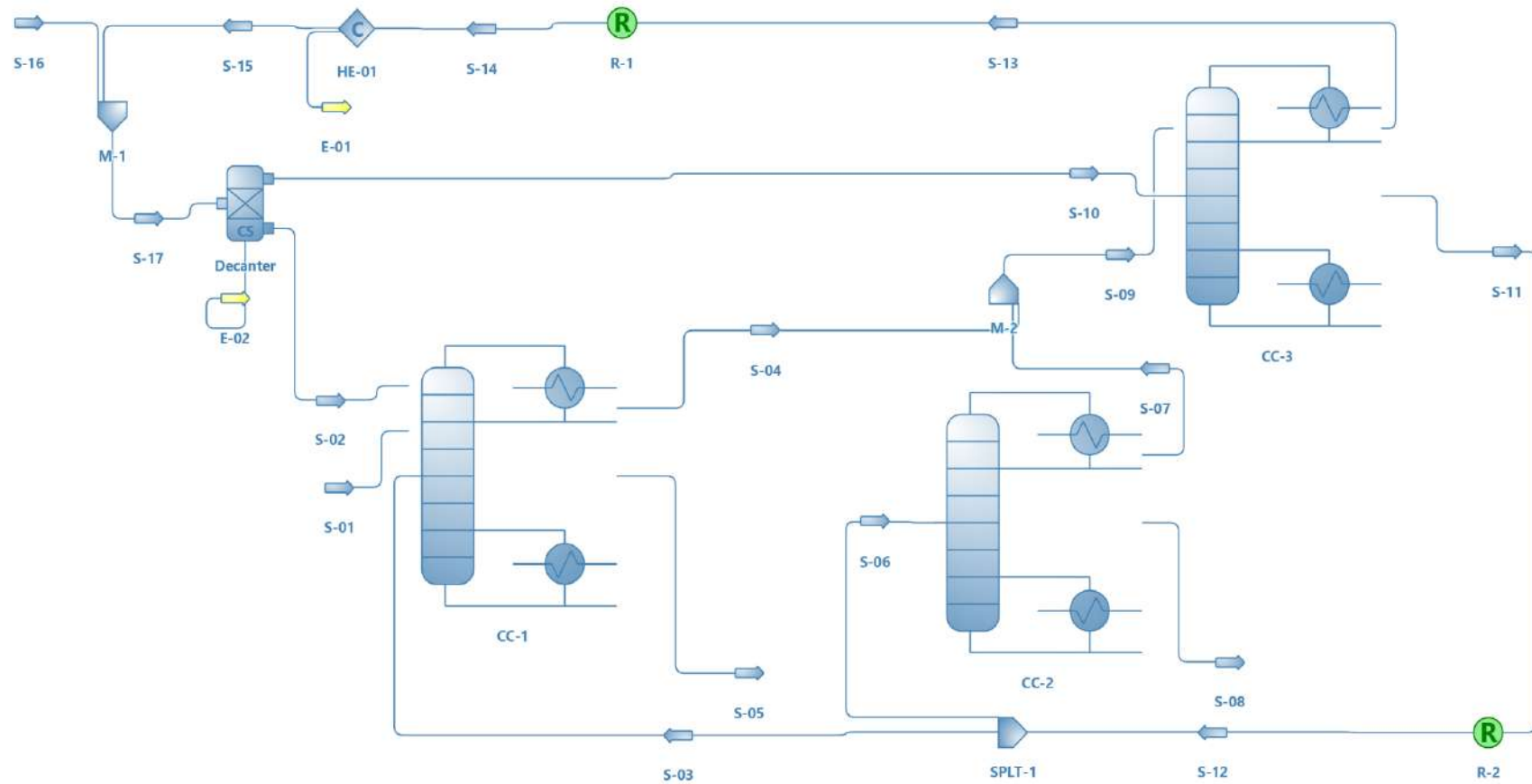


Figura 18-3. Diagrama de proceso (A-DWC) simulado en DWSIM.
Realizado por: ROJAS R., 2021.

En la figura 18-3., se muestra el diagrama de proceso realizado en DWSIM de la deshidratación de tert-butanol utilizando un proceso de columna de pared divisoria mediante destilación azeotrópica heterogénea, se considera que la nomenclatura usada para designar a cada corriente y operación es diferente a la de la bibliografía, debido a que se debe cumplir ciertos parámetros de nomenclatura establecida en DWSIM para poder subir la simulación, los cuales son los siguientes puntos:

- Corrientes de Materia se deben nombrar con: S-01, S-02, etc.
- Corrientes de Energía se deben nombrar con; E-01, E-02, etc.
- Las operaciones unitarias se designaran de la siguiente manera:
 - Las columnas de destilación: DC-01, DC-03, etc. (Dependerán del tipo de destilación a realizar)
 - Los Intercambiadores de Calor: HE-01, HE-02, etc.
 - Los mezcladores (M-1), etc. Los divisores de corriente (SPLT-1), el separador de componentes con el nombre de decantador y por último los operadores lógicos como el bloque de reciclaje (R-1). (DWSIM, 2020)

3.3. Análisis estadístico

El análisis estadístico para validar la simulación realizada respecto a la del artículo científico, se utiliza en test ANOVA, el cual nos indicara la correlación y diferencia entre los datos a comparar, siendo el principal objetivo de este test medir la diferencia y determinar si esta es significativa o no entre los grupos de datos a comparar.

CAPITULO IV

4. GESTIÓN DE PROYECTO

4.1.1. Cronograma

Tabla 1-4. Cronograma del proyecto

ACTIVIDAD	MESES															
	1				2				3				4			
	SEMANAS															
	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4
Revisión bibliográfica																
Elaboración del anteproyecto																
Determinación de variables																
Simulación del sistema de deshidratación de tert-butanol mediante columnas de pared divisoria de azeótropos.																
Obtención de datos experimentales																
Validación del método y determinación de eficiencia																
Estudio técnico y económico																
Redacción del trabajo final																
Análisis de costos																
Revisión del documento final																
Defensa de los resultados																

Realizado por: ROJAS R., 2021.

4.1.2. Presupuesto

En la tabla 2.4 se detallan los costos del trabajo de integración curricular.

Tabla 2-4. Presupuesto del proyecto.

PRESUPUESTO			
ACTIVIDAD	MONTO	FUENTE DE FINANCIAMIENTO	
		INTERNA	EXTERNA
Investigación y aprendizaje (internet)	\$30	X	
Impresión del documento final	\$30	X	
Copias e impresiones adicionales	\$20	X	
Empastados	\$30	X	
TOTAL	\$110		

Realizado por: ROJAS R., 2021.

4.1.3. Recursos y Materiales

El trabajo de titulación se desarrolló mediante el uso de los siguientes programas:

- Software Libre DWSIM v6.1 Update 10 (Classic UI) – Software CAPE-OPEN/ChemSep
- Statgraphics: Software para realizar el análisis estadístico de los resultados obtenidos en la simulación de DWSIM.

4.2. Resultados, Discusión y Análisis De Resultados

4.2.1. Simulación en DWSIM

En la figura 18-3., se muestra la simulación completa además de la tabla de resultados obtenidos en el simulador, en la tabla 6-4., se muestra los resultados obtenidos en el simulador y los de la bibliografía, donde se analiza y se describe su porcentaje de error respecto a los de la bibliografía, además se muestra en la tabla 3-4., los valores obtenidos y

una comparación respecto a costes de gastos respecto a las columnas de destilación convencionales, con esto además de validar el proceso se da una visión más amplia acerca de los beneficios en la implementación de columnas de pared divisoria a los sistemas convencionales, respecto a aprovechamiento de energía lo cual se traduce a costes de producción y diseño.

Además en la figura 18-3., se detallan algunas adecuaciones que se adaptaron al sistema en DWSIM, en esto se especifica algunos equipos los cuales no están en la simulación de la bibliografía, los cuales generan una variación en los resultados finales, como la adición de 2 mezcladores, 2 bloques de recirculación y un separador de componentes el cual necesita una corriente de energía en la simulación en DWSIM.

4.2.1.1. Comparación de los resultados económicos

Tabla 3-4. Datos de los resultados económicos del proceso convencional y A-DWC

Parámetros	Dos columnas Convencionales	A-DWC
NT1	8	6
NT2	32	31
NT3	---	2
β L	---	0.90
Diámetro de la columna (m)	0.98/1.74	1.62
Tambor de reflujo (L/H)m	0.47/0.94	---
Base (L/H)m	1.01/2.02; 0.82/1.64	0.47/0.94; 0.83/1.66
Decantador (L/H)m	2.00/4.00	1.90/3.80
Calor re hervidor (GJ/h)	6.99/14.61	6.44/10.03
Calor condensador (GJ/h)	5.82	---
Calor intercambiador de calor (GJ/h)	14.69	15.37
Inversión de capital (10 ⁶ \$)	0.688	0.752*
Costo de producción (10 ⁶ \$)	1.210	0.922
TAC (10 ⁶ \$)	1.465	1.173
*La inversión de capital del A-DWC aumenta aproximadamente un 20% si se considera la dificultad de fabricación del A-DWC.		

Fuente: (Yu et al, 2015, p. 3390)

Realizado por: ROJAS R., 2021.

4.2.1.2. Resultados obtenidos en la simulación en DWSIM

Tabla 4-4. Resultados de energía obtenidos en la simulación en DWSIM

Object	E-02	E-01	Units
Energy Flow	43,7627	4269,44	kW

Realizado por: ROJAS R., 2021.

Tabla 5-4. Resultados de los datos obtenidos en la simulación A-DWC en DWSIM.

Object	S-16	S-13	S-10	S-08	S-07	S-06	S-05	S-04	S-02	S-01	Units
Temperature	298,15	356,216	312,233	360,394	353,659	353,492	371,694	353,307	312,233	298,15	K
Pressure	101325	101325	101325	121995	101325	101325	104770	101325	101325	101325	Pa
Molar Flow	0,001111	100,69	88,3342	13,8889	70,5551	84,444	14,4275	35,3469	12,6139	27,7778	mol/s
Density (Mixture)	773,303	2,26156	785,045	711,973	2,08531	758,898	958,538	1,84325	970,376	878,978	kg/m ³
Specific Enthalpy (Mixture)	-388,875	84,4207	-498,23	-386,739	85,2341	-502,47	-2221,6	86,0703	-1997,88	-930,336	kJ/kg
Specific Entropy (Mixture)	-1,10249	0,492371	-1,20018	-1,06287	0,47473	-1,18979	-5,8766	0,479764	-5,36501	-2,42101	kJ/[kg.K]
Molar Enthalpy (Mixture)	-32727,5	5580,39	-36073,1	-28665,7	5157,76	-31530,6	-4027,21	4599,22	-44643,7	-42859,1	kJ/kmol
Molar Entropy (Mixture)	-92,7849	32,5468	-86,896	-78,7815	28,7273	-74,6606	-106,528	25,6365	-119,884	-111,532	kJ/[kmol.K]
Molar Flow (Vapor)	0	100,69	0	0	70,5551	0,001183	6,36E-09	35,3469	0	0	mol/s
Molar Fraction (Vapor)	0	1	0	0	1	1,40E-05	4,41E-10	1	0	0	
Molar Flow (Overall Liquid)	0,001111	0	88,3342	13,8889	0	84,4428	14,4275	0	12,6139	27,7778	mol/s
Molar Fraction	0	0,410864	0,457315	1	0,682442	0,734673	0,002	0,614252	0,076	0,5	

(Mixture) / 2-methyl-2-propanol												
Molar Flow (Mixture) / 2-methyl-2-propanol	0	41,3701	40,3966	13,8889	48,1498	62,0387	0,028855	21,7119	0,958656	13,8889	mol/s	
Molar Fraction (Mixture) / Water	0	0,210648	0,108346	1,64E-07	0,253934	0,212168	0,998	0,37128	0,923	0,5		
Molar Fraction (Mixture) / Cyclohexane	1	0,378488	0,434339	3,67E-17	0,0636236	0,053159	2,75E-11	0,0144677	0,00100006	0		
Molar Flow (Mixture) / Cyclohexane	0,001111	38,1101	38,367	5,09E-16	4,48897	4,48897	3,97E-10	0,511389	0,0126146	0	mol/s	
Phases	Liquid Only	Vapor Only	Liquid Only	Liquid Only	Vapor Only	Mixed	Mixed	Vapor Only	Liquid Only	Liquid Only		
Gibbs Free Energy (Vapor)	0	-90,9701	0	0	-82,6583	-79,0594	-34,7604	-83,4338	0	0	kJ/kg	
Internal Energy (Liquid 1)	-520,08	-678,282	-592,751	-543,295	-618,23	-584,989	-2352,3	-744,158	-2098,03	-997,25	kJ/kg	
Energy Flow	-0,036364	561,891	-3186,49	-398,136	363,907	-2662,57	-581,026	162,568	-563,132	-1190,53	kW	

Realizado por: ROJAS R., 2021.

4.2.2. Balance de materia

El balance de materia realizado a la simulación de deshidratación de tert-butanol utilizando

un proceso de columna de pared divisoria mediante destilación azeotrópica heterogénea, se lo realiza como un método adicional de validación de la simulación, realizándolo de manera parcial y breve realizando solo un balance de masa de los flujos molares.

4.2.2.1. Balance general

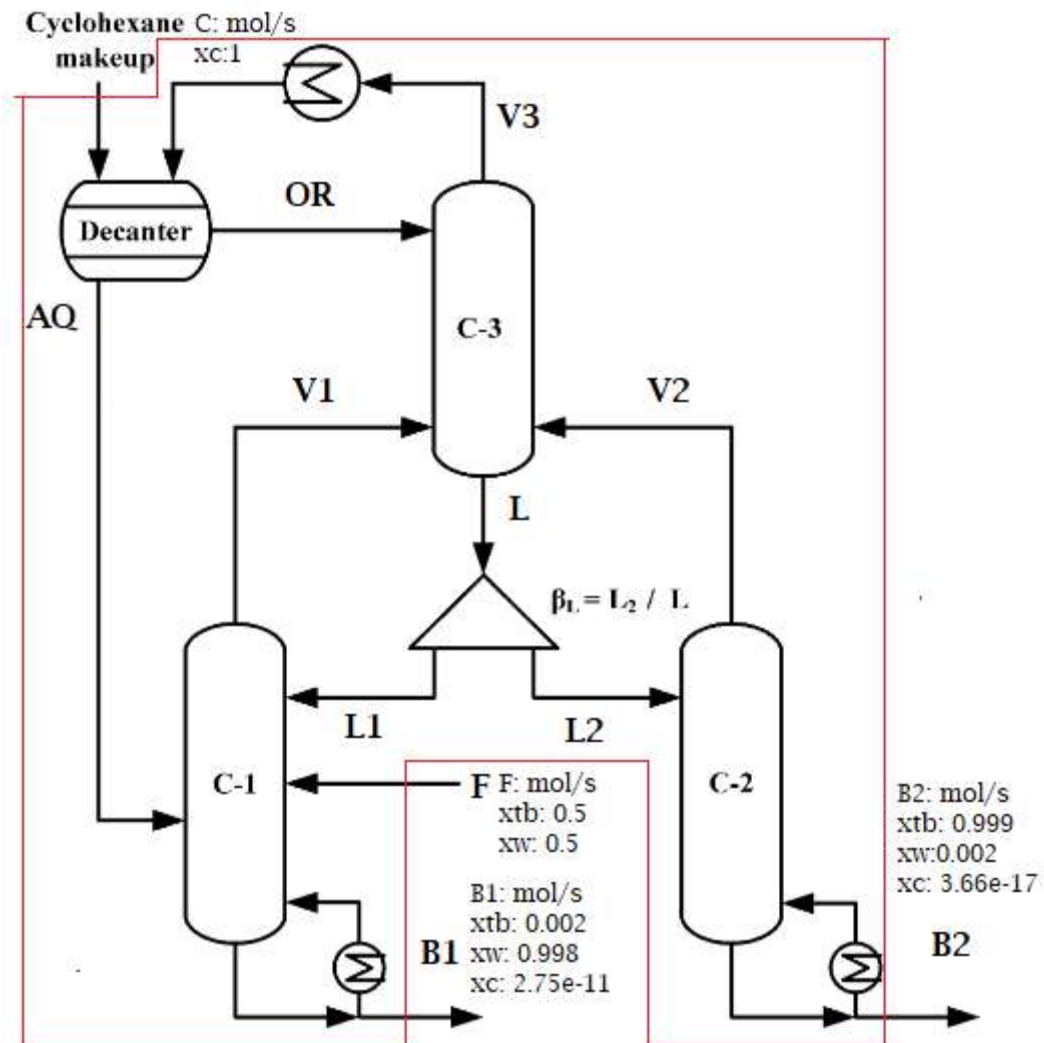


Figura 1-4. Diagrama de balance general de masa.
Realizado por: ROJAS R., 2021.

En el balance general del proceso se delimita entradas y salidas globales del sistema. Obteniendo las siguientes ecuaciones:

$$F + C = B1 + B2 \text{ (Balance Global)} \quad \text{Ecuación 1}$$

$$F x_{tb_F} = B1 x_{tb_{B1}} + B2 x_{tb_{B2}} \text{ (Balance por componentes tert - butanol)} \quad \text{Ecuación 2}$$

$$F x_{w_F} = B1 x_{w_{B1}} + B2 x_{w_{B2}} \text{ (Balance por componentes agua)} \quad \text{Ecuación 3}$$

$$C x_{c_C} = B1 x_{c_{B1}} + B2 x_{c_{B2}} \text{ (Balance por componentes ciclohexano)} \quad \text{Ecuación 4}$$

Donde:

- F Flujo de entrada a la columna C-1. (mol/s)
- C Flujo de entrada del agente de arrastre al decantador (ciclohexano). (mol/s)
- B1 Flujo de fondo de la columna C-1. (mol/s)
- B2 Flujo de fondo de la columna C-2. (mol/s)
- x_{tb_i} Fracción molar de tert-butanol (i depende del flujo)
- x_{w_i} Fracción molar de agua (i depende del flujo)
- x_{c_i} Fracción molar de ciclohexano (i depende del flujo)

Como datos para la resolución del balance global de masa tenemos que el flujo F es igual a 27,778(mol/s) y el flujo C es de 0.00111 (mol/s), se tiene 2 incógnitas que son los flujos de fondo de las dos columnas, resolviendo con las ecuaciones anteriores se tiene:

$$F + C = B1 + B2 \text{ (Balance Global)}$$

$$27.778 + 0.00111 = B1 + B2$$

$$27.77911 - B2 = B1$$

$$F x_{tb_F} = B1 x_{tb_{B1}} + B2 x_{tb_{B2}} \text{ (Balance por componentes tert - butanol)}$$

$$F x_{tb_F} = B1 x_{tb_{B1}} + B2 x_{tb_{B2}}$$

$$27.778 (0.5) = B1(0.002) + B2(0.999)$$

Reemplazo la ecuación del balance global en el balance por componentes, así se obtiene:

$$27.778 (0.5) = (27.77911 - B2)(0.002) + B2(0.999)$$

$$27.778 (0.5) = (27.77911 - B2)(0.002) + B2(0.999)$$

$$B2 = 13.875 \text{ mol/s}$$

$$27.77911 - B2 = B1$$

$$B1 = 27.77911 - 13.875$$

$$B1 = 13.90 \text{ mol/s}$$

4.2.2.2. Balance de columna C-1

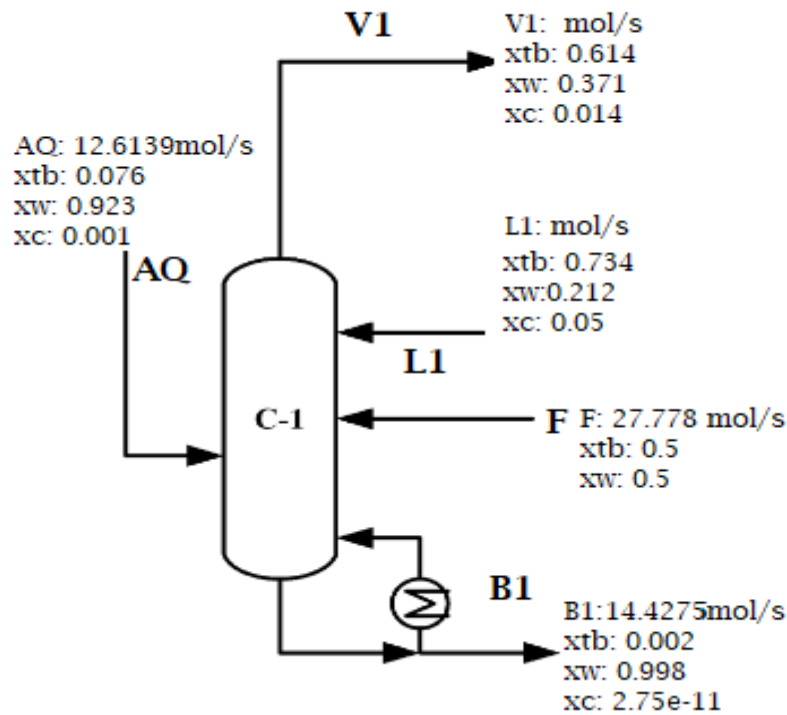


Figura 2-4. Diagrama de balance de masa C-1.

Realizado por: ROJAS R., 2021.

Se realiza el balance de masa para la C-1, donde se especifican composiciones para poder determinar entradas y salidas, las ecuaciones para la resolución son:

Donde:

- AQ Flujo de fase acuosa proveniente del decantador. (mol/s)
- L1 Corriente de entrada a la C-1. (mol/s)
- V1 Corriente de destilado de la C-1 (mol/s)

$$F + AQ + L1 = B1 + V1 \text{ (Balance Global)} \quad \text{Ecuación 5}$$

$$Fxtb_F + AQxtb_{AQ} + L1xtb_{L1} = B1xtb_{B1} + V1xtb_{V1} \text{ (Balance por componentes } t - \text{butanol)} \quad \text{Ecuación 6}$$

$$F xw_F + AQ xw_{AQ} + L1 xw_{L1} = B1 xw_{B1} + V1 xw_{V1} \text{ (Balance por componentes agua)} \quad \text{Ecuación 7}$$

$$AQxc_{AQ} + L1xc_{L1} = B1xc_{B1} + V1xc_{V1} \text{ (Balance por componentes ciclohexano)} \quad \text{Ecuación 8}$$

En este apartado las incógnitas son los flujos molares L1 y V1, los cuales se resuelven de la siguiente manera:

$$27.778 + 12.6139 + L1 = 14.4275 + V1 \text{ (Balance Global)}$$

$$25.9644 + L1 = V1$$

$$AQxc_{AQ} + L1xc_{L1} = B1xc_{B1} + V1xc_{V1} \text{ (Balance por componentes ciclohexano)}$$

$$12.6139(0.001) + L1(0.05) = 14.4275(2.75e - 11) + V1(0.014)$$

Reemplazo la ecuación del balance global en la ecuación parcial de componentes, para poder obtener los valores necesarios como son los flujos L1 y V1.

$$12.6139(0.001) + L1(0.05) = 14.4275(2.75e - 11) + (25.9644 + L1)(0.014)$$

$$L1 = 9.746 \text{ mol/s}$$

$$25.9644 + 9.746 = V1$$

$$V1 = 35.71 \text{ mol/s}$$

4.2.2.3. Balance de columna C-2

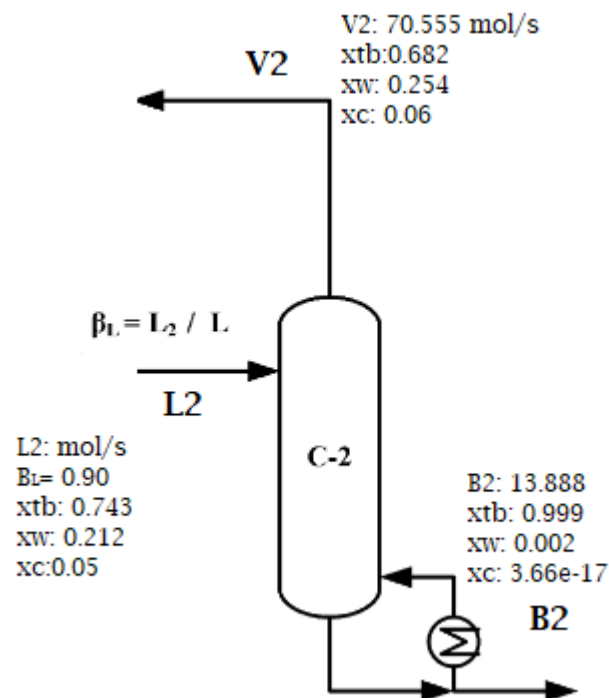


Figura 3-4. Diagrama de balance de masa columna C-2.
Realizado por: ROJAS R., 2021.

Para la C-2 se requiere calcular el flujo molar de entrada L2 y L proveniente de la relación de división de líquidos (βL). Las ecuaciones del balance de masa son:

$$L2 = B2 + V2 \text{ (Balance Global)} \quad \text{Ecuación 9}$$

$$L2x_{tb_{L2}} = B2x_{tb_{B2}} + V2x_{tb_{V2}} \text{ (Balance por componentes } t - \text{butanol)} \quad \text{Ecuación 10}$$

$$L2x_{w_{L2}} = B2x_{w_{B2}} + V2x_{w_{V2}} \text{ (Balance por componentes agua)} \quad \text{Ecuación 11}$$

$$L2x_{c_{L2}} = B2x_{c_{B2}} + V2x_{c_{V2}} \text{ (Balance por componentes ciclohexano)} \quad \text{Ecuación 12}$$

$$\beta L = L2/L \text{ (Relacion de división líquida)}$$

Donde:

- V2 Corriente de destilado de C-2. (mol/s)
- L2 Flujo de entrada a la C-2 (mol/s)
- L Flujo salida de C-3 (mol/s)
- βL Relación de división Líquida

$$L2 = B2 + V2 \text{ (Balance Global)}$$

$$L2 = 70.555 + 13.888$$

$$L2 = 84.443 \text{ mol/s}$$

$$\beta L = L2/L \text{ (Relacion de división líquida)}$$

$$L = L2/\beta L$$

$$L = 84.443/0.9$$

$$L = 93.82 \text{ mol/s}$$

4.2.2.4. Balance de columna C-3.

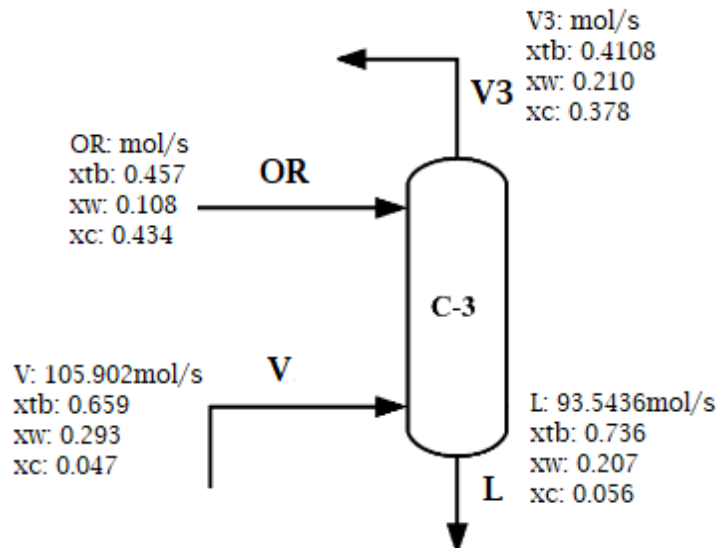


Figura 4-4. Diagrama de balance de masa columna C-3.
Realizado por: ROJAS R., 2021.

Se realiza el balance de masa para la C-3, donde se especifican composiciones para poder determinar entradas y salidas, las ecuaciones para la resolución son:

$$V + OR = L + V3 \text{ (Balance Global)} \quad \text{Ecuación 13}$$

$$Vx_{tb_V} + ORx_{tb_{OR}} = Lx_{tb_L} + V3x_{tb_{V3}} \text{ (Balance por componentes } t - \text{butanol)} \quad \text{Ecuación 14}$$

$$Vx_{w_V} + ORx_{w_{OR}} = Lx_{w_L} + V3x_{w_{V3}} \text{ (Balance por componentes agua)} \quad \text{Ecuación 15}$$

$$Vx_{c_V} + ORx_{c_{OR}} = Lx_{c_L} + V3x_{c_{V3}} \text{ (Balance por componentes ciclohexano)} \quad \text{Ecuación 16}$$

Donde:

- OR Flujo de fase orgánica del decantador. (mol/s)
- V Corriente de entrada a la C-3, valor de V1 y V2 mezclados. (mol/s)
- V3 Corriente de destilado de la C-3 (mol/s)

En este apartado las incógnitas son los flujos molares OR y V3, los cuales se resuelven de la siguiente manera:

$$105.902 + OR = 93.5436 + V3 \text{ (Balance Global)}$$

$$12.3584 + OR = V3$$

$$105.902(0.659) + OR(0.457) = 93.5436(0.736) + V3(0.4108) \text{ (Balance } t - \text{butanol)}$$

$$105.902(0.659) + OR(0.457) = 93.5436(0.736) + V3(0.4108)$$

Reemplazo la ecuación del balance global en la ecuación parcial de componentes, para poder obtener los valores necesarios como son los flujos OR y V3.

$$105.902(0.659) + OR(0.457) = 93.5436(0.736) + (12.3584 + OR)(0.4108)$$

$$OR = 89.51 \text{ mol/s}$$

$$12.3584 + 89.51 = V3$$

$$V3 = 101.87 \text{ mol/s}$$

4.2.2.5. Balance en el decantador

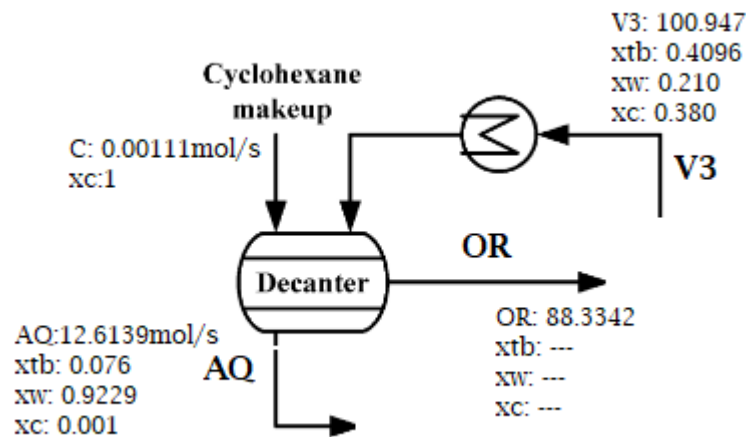


Figura 5-4. Diagrama de balance de masa decantador
Realizado por: ROJAS R., 2021.

Los flujos molares en las corrientes han sido determinados, en este caso para el decantador se calculara los porcentajes molares para el componente en fase orgánica. Las ecuaciones para el cálculo son:

$$C + V3 = AQ + OR \text{ (Balance Global)} \quad \text{Ecuación 17}$$

$$V3x_{tb_{OR}} = AQx_{tb_{AQ}} + ORx_{tb_{OR}} \text{ (Balance por componentes } t - \text{butanol)} \quad \text{Ecuación 18}$$

$$V3x_{w_{V3}} = AQx_{w_{AQ}} + ORx_{w_{OR}} \text{ (Balance por componentes agua)} \quad \text{Ecuación 19}$$

$$Cxc_C + V3xc_{V3} = AQxc_{AQ} + ORxc_{OR} \text{ (Balance por componentes ciclohexano)} \quad \text{Ecuación 20}$$

Donde:

$x_{tb_{OR}}$ Porcentaje de tert-butanol OR (%)

$x_{w_{OR}}$ Porcentaje de agua OR. (%)

$x_{C_{OR}}$ Porcentaje de ciclohexano OR (%)

$$V3x_{tb_{OR}} = AQx_{tb_{AQ}} + ORx_{tb_{OR}} \text{ (Balance por componentes } t - \text{butanol)}$$

$$100.947(0.4096) = 12.6139(0.076) + 88.3342x_{tb_{OR}}$$

$$x_{tb_{OR}} = 0.4573$$

$$V3x_{w_{V3}} = AQx_{w_{AQ}} + ORx_{w_{OR}} \text{ (Balance por componentes agua)}$$

$$100.947(0.210) = 12.6139(0.9229) + 88.3342x_{w_{OR}}$$

$$x_{w_{OR}} = 0.1081$$

$$C_{C_{C}} + V3x_{C_{V3}} = AQx_{C_{AQ}} + ORx_{C_{OR}} \text{ (Balance por componentes ciclohexano)}$$

$$0.00111(1) + 100.947(0.380) = 12.6139(0.001) + 88.3342x_{C_{OR}}$$

$$x_{C_{OR}} = 0.434$$

4.2.3. Balance de energía

El balance de energía realizado a la simulación de deshidratación de tert-butanol utilizando un proceso de columna de pared divisoria mediante destilación azeotrópica heterogénea, se lo realiza como un método adicional de validación de la simulación, realizándolo de manera parcial y breve realizando solo balance para encontrar entalpías de salida y compararlas con las obtenidas en la simulación, se usaran datos ya dados o establecidos en la simulación, como entalpías, calores específicos, calor de condensadores y re hervidores. Adicional se considerara las temperaturas como guía en el análisis, ya que solo como dato se tiene la temperatura de entrada a la columna de destilación C-1. Para facilidad de cálculos con los calores específicos y entalpías, que vienen en unidades de KJ/kg*K y KJ/kg, se considera los flujos de corrientes de entradas y de salidas en unidades de kg/s.

4.2.3.1. Determinación de grados de libertad en el proceso global para los posteriores balances

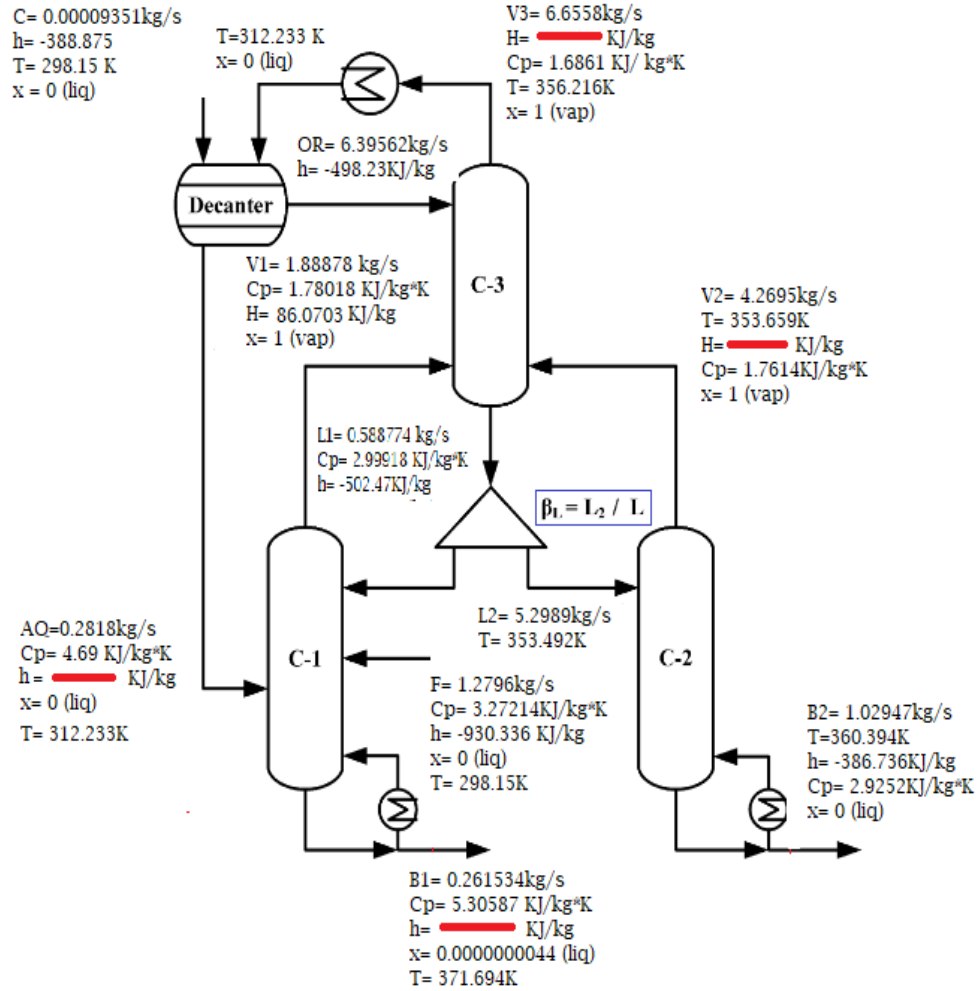


Figura 6-4. Diagrama de proceso, determinación Grados de Libertad.
 Realizado por: ROJAS R., 2021.

Tabla 6-4. Análisis de los Grados de Libertad para el proceso

Análisis de Grados de Libertad											
	C-1		C-2		C-3		Divisor de Corriente		Decantador		Condensador
	BM	BC	BM	BC	BM	BC	BM	BC	BM	BC	BC
#TOTAL VARIABLES INDEPEND.	2	14	3	10	3	11	3	7	3	12	8
# Flujos	2	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3
Calidad Vapor	0	5	0	3	0	4	0	0	0	4	2
Flujo Calor	0	1	0	1	0	0	0	1	0	1	1
Temperaturas	0	5	0	3	0	4	0	3	0	4	2
#TOTAL VARIABLES CONOCIDAS	1	12	1	9	1	10	1	6	1	11	7
# B. Masa	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0
# B. Energía	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	1
# Flujos Espec.	0	3	0	3	0	3	0	2	0	3	2
# Temp. Espec.	0	3	0	2	0	2	0	1	0	3	1

# Calidad Vapor Espec.	0	3	0	1	0	3	0	0	0	2	2
# Relaciones Adicionales	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0
Flujo Calor	0	1	0	1	0	0	0	0	0	1	1
Grados de Libertad	1	2	2	1	2	1	0	1	2	1	1

Realizado por: ROJAS R., 2021.

4.2.3.2. Balance de energía en la columna C-1

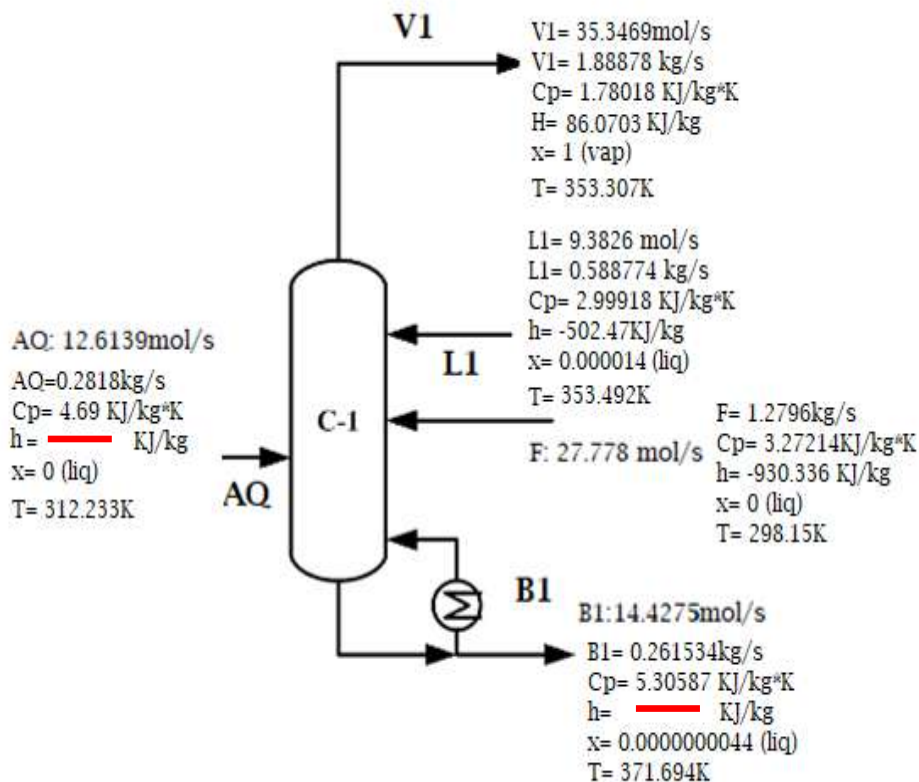


Figura 7-4. Diagrama de balance de energía C-1.

Realizado por: ROJAS R., 2021.

Se realiza el balance de energía para la C-1, donde se especifican calores específicos y entalpías de la mezcla para poder determinar las entalpías de la Fase Acuosa (AQ) y fondo (B1), las ecuaciones para la resolución son:

- Balance de Energía Global

$$Q_e + W_e + \sum me (Eke + Epe + He) = Q_s + W_s + \sum ms (Eks + Eps + Hs) \quad \text{Ecuación 21}$$

$$Q_e + W_e + \sum me (Eke + Epe + He) = Q_s + W_s + \sum ms (Eks + Eps + Hs)$$

$$Q_e + \sum me (He) = \sum ms (Hs) \quad \text{Ecuación 22}$$

Donde:

- $Q_{e,s}$ Calor entrada o salida en el sistema (KJ/s)
- $m_{e,s}$ Corriente de entrada y salida del sistema (kg/s)
- He,s Entalpia gas en la entrada o salida del sistema (KJ/kg)
- he,s Entalpia liquido en la entrada o salida del sistema (KJ/kg)

En este apartado las incógnitas son las entalpias de B1 (h_{B1}), se considera el valor obtenido en el cálculo de energía del decantador AQ (h_{AQ}) de (-1688.49 KJ/kg) y el valor de calor del re hervidor con un valor de (1749.1 KJ/s), los cuales se resuelven de la siguiente manera:

$$Q_e + \sum m_e (H_e) = \sum m_s (H_s) \quad \text{Ecuación 24}$$

$$Q_e + m_{AQ} * h_{AQ} + m_{L1} * h_{L1} + m_F * h_F = m_{V1} * H_{V1} + m_{B1} * h_{B1}$$

$$\frac{Q_e + m_{AQ} * h_{AQ} + m_{L1} * h_{L1} + m_F * h_F - m_{V1} * H_{V1}}{m_{B1}} = h_{B1}$$

$$h_{B1} = \frac{1749.1 - 0.28 * 1688.49 - 0.58 * 502.4 - 1.279 * 930.3 - 1.8 * 86.07}{0.26}$$

$$h_{B1} = -1384.03 \text{ KJ/kg}$$

4.2.3.3. Balance de columna C-2

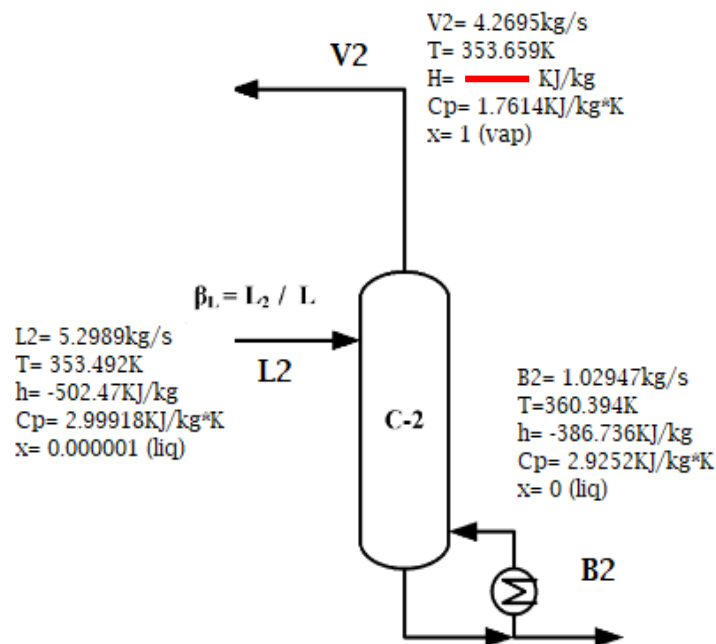


Figura 8-4. Diagrama de balance de energía columna C-2.

Realizado por: ROJAS R., 2021.

Se realiza el balance de energía para la C-2, donde se especifican calores específicos y entalpías de la mezcla para poder determinar las entalpías de la cabeza de destilado V2 (H_{V2}) las ecuaciones para la resolución son:

- Balance de Energía Global

$$Q_e + W_e + \sum m_e (E_{ke} + E_{pe} + H_e) = Q_s + W_s + \sum m_s (E_{ks} + E_{ps} + H_s) \quad \text{Ecuación 25}$$

$$Q_e + \cancel{W_e} + \sum m_e (\cancel{E_{ke}} + \cancel{E_{pe}} + H_e) = \cancel{Q_s} + \cancel{W_s} + \sum m_s (\cancel{E_{ks}} + \cancel{E_{ps}} + H_s)$$

$$Q_e + \sum m_e (H_e) = \sum m_s (H_s) \quad \text{Ecuación 26}$$

Donde:

- $Q_{e,s}$ Calor entrada o salida en el sistema (KJ/s)
- $m_{e,s}$ Corriente de entrada y salida del sistema (kg/s)
- $H_{e,s}$ Entalpia gas en la entrada o salida del sistema (KJ/kg)
- $h_{e,s}$ Entalpia liquido en la entrada o salida del sistema (KJ/kg)

En este apartado las incógnitas son las entalpías de V2 (h_{V2}) y se considera el calor de entrada como el calor suministrado u ocupado en el re hervidor con un valor de 2902.1 KJ/s, los cuales se resuelven de la siguiente manera:

$$Q_e + \sum m_e (H_e) = \sum m_s (H_s) \quad \text{Ecuación 27}$$

$$Q_e + m_{L2} * h_{L2} = m_{V2} * H_{V2} + m_{B2} * h_{B2}$$

$$\frac{Q_e + m_{L2} * h_{L2} - m_{B2} * h_{B2}}{m_{V2}} = H_{V2}$$

$$H_{V2} = \frac{2902.1 - 5.29 * 502.4 + 1.02 * 386.7}{4.2695}$$

$$H_{V2} = 149.34 \text{ KJ/kg}$$

4.2.3.4. Balance de columna C-3.

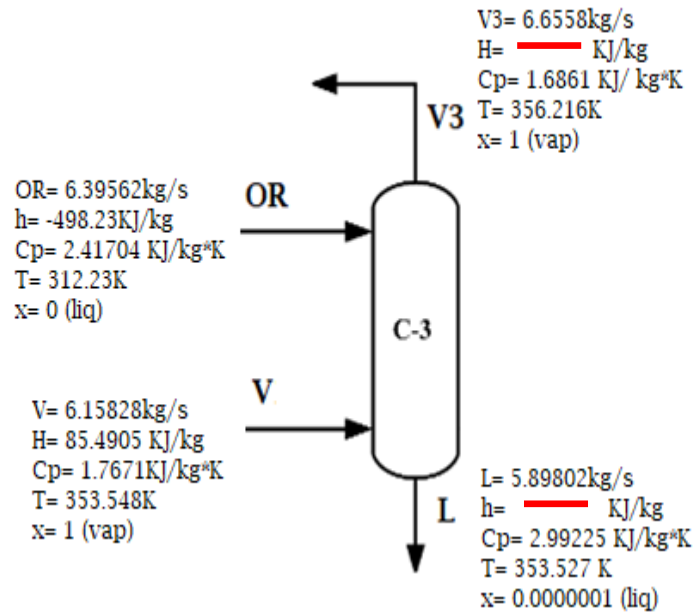


Figura 9-4. Diagrama de balance de energía columna C-3.
 Realizado por: ROJAS R., 2021.

Se realiza el balance de energía para la C-3, donde se especifican calores específicos y entalpías de la mezcla para poder determinar las entalpías del fondo (L), se considera el valor de la entalpía de (V3), resuelto en el balance de energía del condensador las ecuaciones para la resolución son:

- Balance de Energía Global

$$Q_e + W_e + \sum m_e (E_{ke} + E_{pe} + H_e) = Q_s + W_s + \sum m_s (E_{ks} + E_{ps} + H_s) \quad \text{Ecuación 28}$$

$$\cancel{Q_e} + \cancel{W_e} + \sum m_e (\cancel{E_{ke}} + \cancel{E_{pe}} + H_e) = \cancel{Q_s} + \cancel{W_s} + \sum m_s (\cancel{E_{ks}} + \cancel{E_{ps}} + H_s)$$

$$\sum m_e (H_e) = \sum m_s (H_s) \quad \text{Ecuación 29}$$

Donde:

- $Q_{e,s}$ Calor entrada o salida en el sistema (KJ/s)
- $m_{e,s}$ Corriente de entrada y salida del sistema (kg/s)
- $H_{e,s}$ Entalpía gas en la entrada o salida del sistema (KJ/kg)
- $h_{e,s}$ Entalpía liquido en la entrada o salida del sistema (KJ/kg)

En este apartado las incógnitas son las entalpías de L (h_L) y V3 (H_{V3}), se considera el valor calculado en el condensador para V3, los cuales se resuelven de la siguiente manera:

$$Q_e + \sum m_e (H_e) = \sum m_s (H_s) \quad \text{Ecuación 30}$$

$$m_{OR} * h_{OR} + m_V * H_V = m_{V3} * H_{V3} + m_L * h_L$$

$$\frac{m_{OR} * h_{OR} + m_V * H_V - m_{V3} * H_{V3}}{m_L} = h_L$$

$$h_L = \frac{(6.39 * (-498.23)) + (6.15 * 85.49) - (6.6558 * 84.41)}{5.89}$$

$$h_L = -546.26 \text{ KJ/kg}$$

4.2.3.5. Balance en el condensador

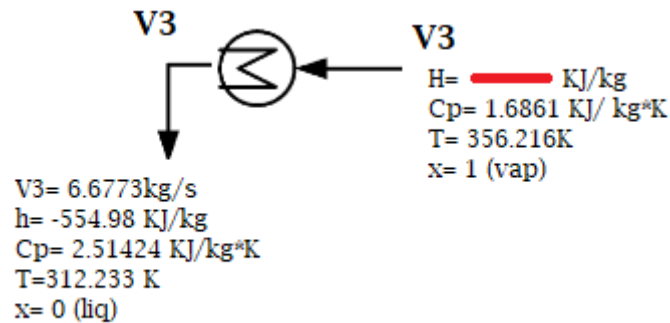


Figura 10-4. Diagrama de balance de energía condensador
 Realizado por: ROJAS R., 2021.

Se realiza el balance de energía para el condensador, donde se especifican calores específicos y entalpías de la mezcla para poder determinar las entalpías de cabeza de destilado (V3), las ecuaciones para la resolución son:

- Balance de Energía Global

$$Q_e + W_e + \sum m_e (E_{ke} + E_{pe} + H_e) = Q_s + W_s + \sum m_s (E_{ks} + E_{ps} + H_s) \quad \text{Ecuación 31}$$

$$Q_e + \cancel{W_e} + \sum m_e (\cancel{E_{ke} + E_{pe} + H_e}) = Q_s + \cancel{W_s} + \sum m_s (\cancel{E_{ks} + E_{ps} + H_s})$$

$$Q_e + \sum m_e * H_e = Q_s + \sum m_s * H_s \quad \text{Ecuación 32}$$

Donde:

- $Q_{e,s}$ Calor entrada o salida en el sistema (KJ/s)
- $m_{e,s}$ Corriente de entrada y salida del sistema (kg/s)
- $H_{e,s}$ Entalpia gas en la entrada o salida del sistema (KJ/kg)
- $h_{e,s}$ Entalpia liquido en la entrada o salida del sistema (KJ/kg)

En este apartado las incógnitas son las entalpías de V3 (h_{V3}), se considera que el flujo de energía es de 4269.44KJ/s, los cuales se resuelven de la siguiente manera:

$$Q_e = m_{V3} (H_{V3} - h_{V3}) \quad \text{Ecuación 33}$$

$$\frac{Q_e}{m_{V3}} + h_{V3} = H_{V3}$$

$$\frac{4269.44}{6.6773} + (-554.98) = H_{V3}$$

$$H_{V3} = 84.4161 \text{ KJ/kg}$$

4.2.3.6. Balance en el decantador

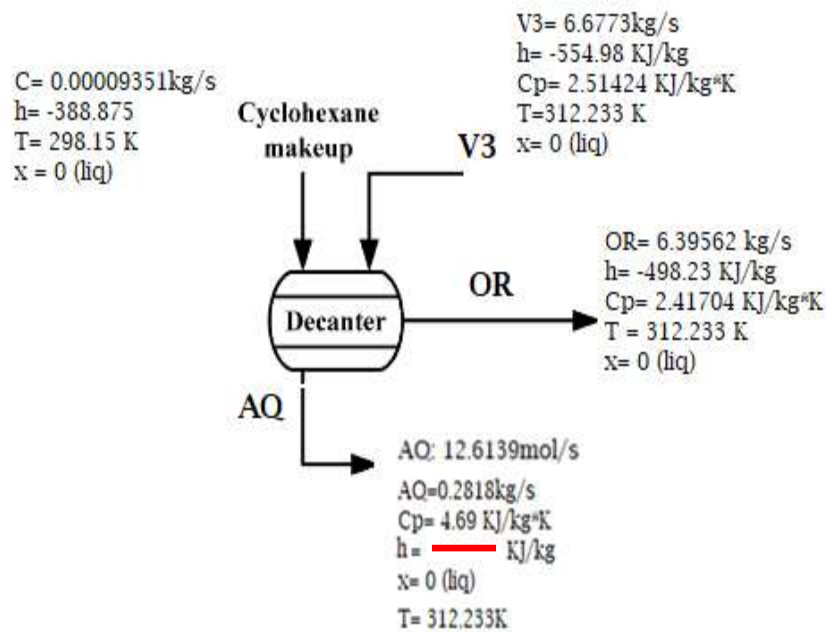


Figura 11-4. Diagrama de balance de masa decantador

Realizado por: ROJAS R., 2021.

Se realiza el balance de energía en el decantador, donde se especifican calores específicos y entalpías de la mezcla para poder determinar las entalpías de la Fase Acuosa (AQ), las ecuaciones para la resolución son:

- Balance de Energía Global

$$Q_e + W_e + \sum me (Eke + Epe + He) = Q_s + W_s + \sum ms (Eks + Eps + Hs) \quad \text{Ecuación 34}$$

$$Q_e + W_e + \sum me (Eke + Epe + He) = Q_s + W_s + \sum ms (Eks + Eps + Hs)$$

$$Q_e + \sum me (He) = \sum ms (Hs) \quad \text{Ecuación 35}$$

Donde:

$Q_{e,s}$ Calor entrada o salida en el sistema (KJ/s)

$m_{e,s}$ Corriente de entrada y salida del sistema (kg/s)

- He,s Entalpia gas en la entrada o salida del sistema (KJ/kg)
- he,s Entalpia liquido en la entrada o salida del sistema (KJ/kg)

En este apartado las incógnitas son las entalpias de AQ (h_{AQ}) y B1 (h_{B1}), además se considera que en la simulación se tiene una corriente de energía Q con un valor de 43.7627KJ/s los cuales se resuelven de la siguiente manera:

$$Q_e + \sum m_e (H_e) = \sum m_s (H_s) \quad \text{Ecuación 36}$$

$$Q_e + m_C * h_C + m_{V3} * h_{V3} = m_{AQ} * h_{AQ} + m_{OR} * h_{OR}$$

$$Q_e + m_C * h_C + m_{V3} * h_{V3} - m_{OR} * h_{OR} = m_{AQ} * h_{AQ}$$

$$h_{AQ} = \frac{Q_e + m_C * h_C + m_{V3} * h_{V3} - m_{OR} * h_{OR}}{m_{AQ}}$$

$$h_{AQ} = \frac{43.7627 + 6.67749 * (-554.978) - 6.3952 * (-498.23)}{0.2818}$$

$$h_{AQ} = -1688.49 \text{ KJ/kg}$$

4.2.4. Perfiles de composición líquida obtenida en la simulación en DWSIM de A-DWC

- **Columna (C-1)**

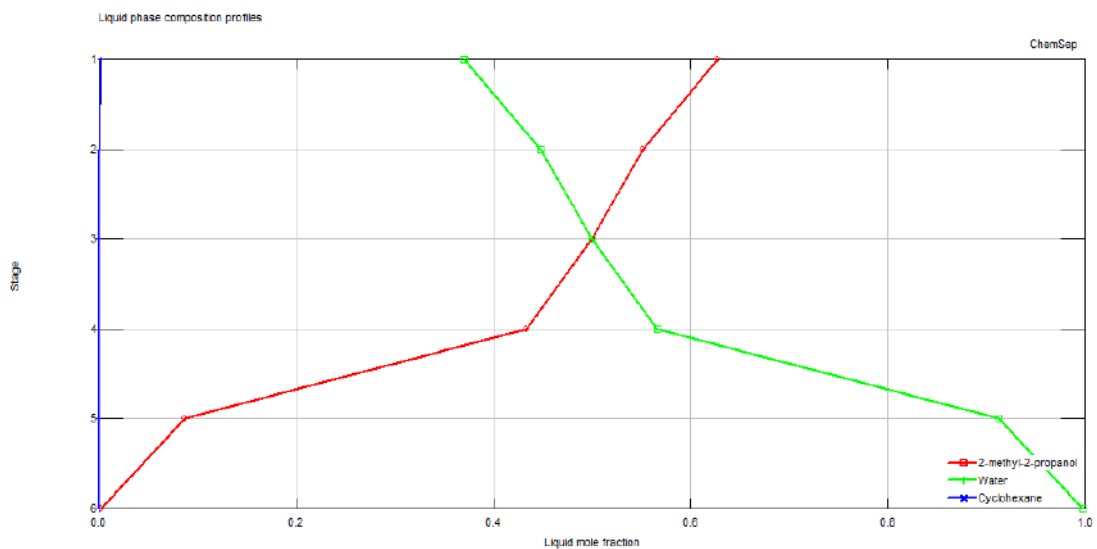


Gráfico 1-4. Perfil de composición líquida de C-1.
Realizado por: ROJAS R., 2021.

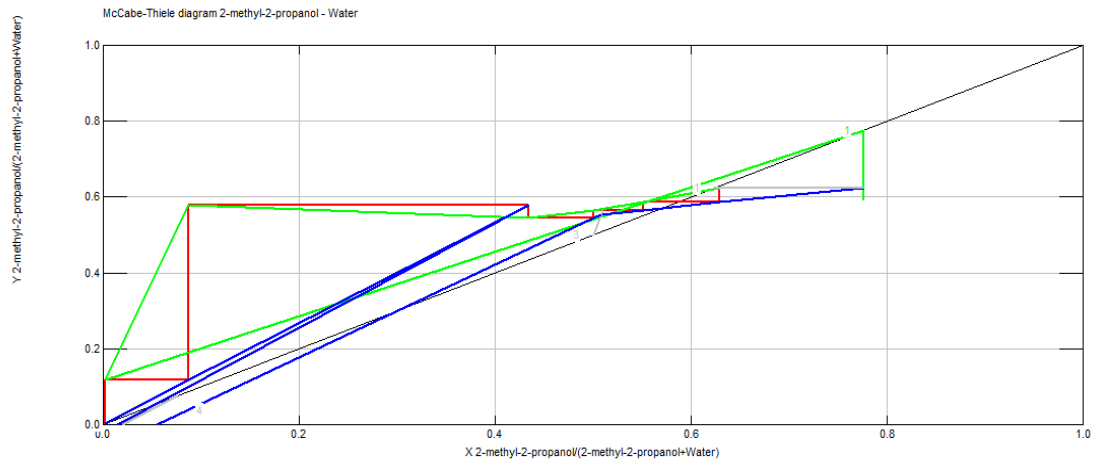


Gráfico 2-4. Perfil de McCabe Thiele C-1.
Realizado por: ROJAS R., 2021.

- **Columna (C-2)**

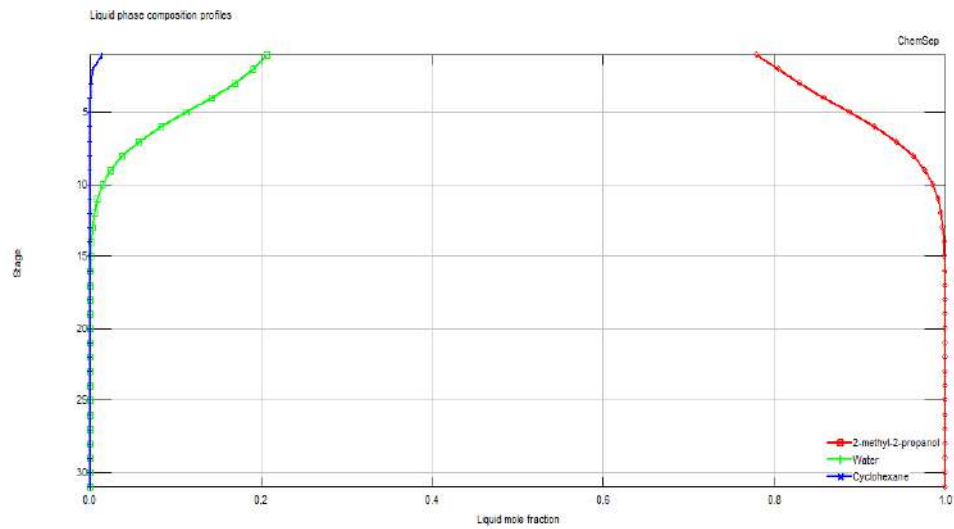


Gráfico 3-4. Perfil de composición líquida de C-2.
Realizado por: ROJAS R., 2021.

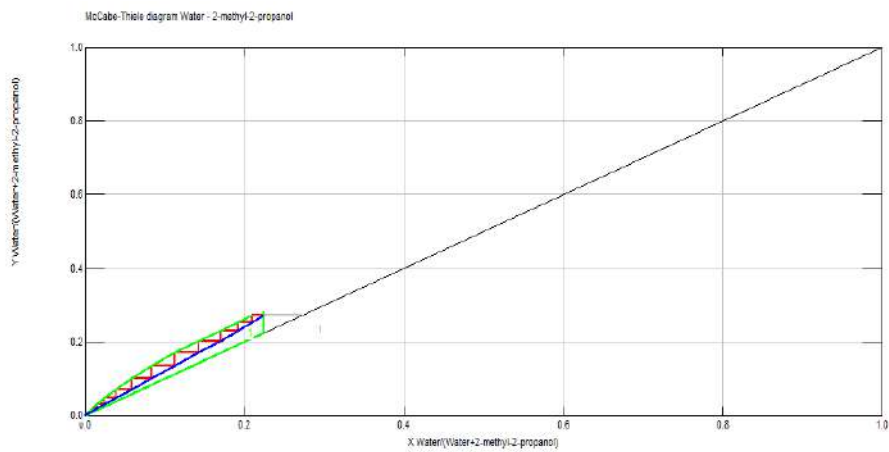


Gráfico 4-4. Perfil de McCabe Thiele de C-2.
Realizado por: ROJAS R., 2021.

- **Columna (C-3)**

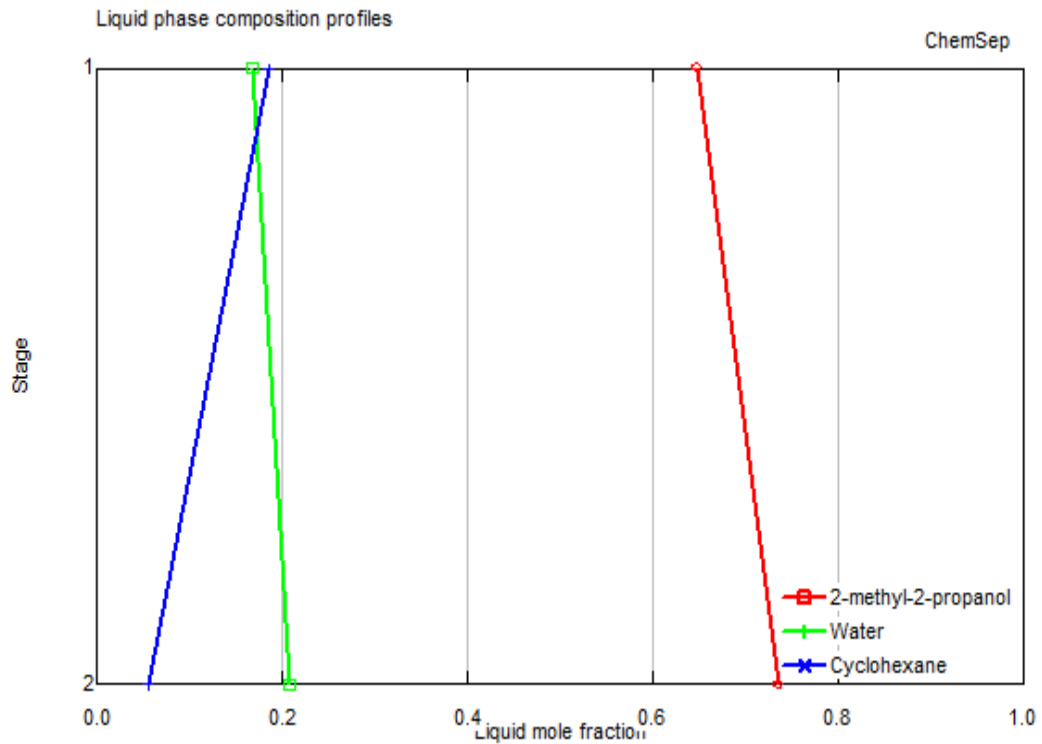


Gráfico 5-4. Perfil de composición líquida de C-3.
Realizado por: ROJAS R., 2021.

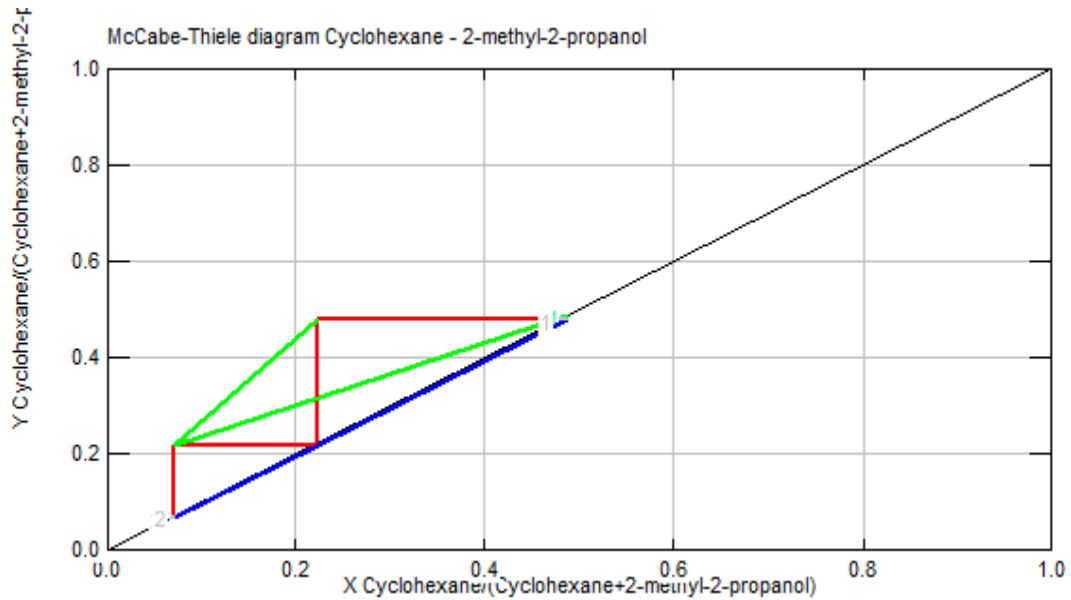


Gráfico 6-4. Perfil de McCabe Thiele de C-3.
Realizado por: ROJAS R., 2021.

4.2.5. Validación de los datos obtenidos en la simulación en DWSIM

Respecto a los análisis y procesamiento de los datos obtenidos en los resultados de la simulación en DWSIM, surge la interrogante de si esta correcto el modelo simulado respecto a los resultados existentes en bibliografía. Los resultados más evidentes en la simulación, como las líneas de flujo principales consideradas en bibliografía, serán los resultados que se valide y se describan en la tabla.7-4, además de detallarse los errores presentes en la composición molar y en los flujos de corriente, cabe recalcar que las trazas existentes en algunos porcentajes molares se adicionan en el análisis, pero estos son despreciables por sus ínfimos valores.

- Para el cálculo del error porcentual se empleó la fórmula:

$$E(\%) = \text{abs}\left(\frac{V_{deseado} - V_{experimental}}{V_{deseado}}\right) \quad \text{Ecuación 37}$$

Tabla 7-4. Resultados de la validación de la simulación

Línea de Flujo	Simulado (mol/s)	Bibliográfico (mol/s)	% Error
F (S-01)	27,777	27,777	0,000
Cyclohexane Make-up (S-16)	0,001	0,001	0,000
Fase Acuosa (AQ) (S-02)	12,614	12,614	0,000
Fase Organica (OR) (S-10)	88,324	88,325	0,001
V1 (S-04)	35,347	35,447	0,283
V2 (S-07)	70,555	66,577	5,975
V3 (S-13)	100,690	100,947	0,255
B1 (C-1) (S-05)	14,428	13,888	3,885
B1 (C-2) (S-08)	13,889	13,889	0,001
L2 (S-06)	84,444	80,467	4,943

Realizado por: ROJAS R., 2021.

Tabla 8-4. Resultados de la validación de la simulación

Simulado (mol%)			Bibliográfico (mol%)			% Error		
t-Butanol	Agua	Ciclohexano	t-Butanol	Agua	Ciclohexano	t-Butanol	Agua	Ciclohexano
0,500	0,500	0,000	0,500	0,500	0,000	0,000	0,000	---
0,000	0,000	1,000	0,000	0,000	1,000	---	---	0,000
0,076	0,923	0,001	0,076	0,923	0,000	0,000	0,000	*387,805
0,457	0,108	0,434	0,464	0,101	0,435	1,509	6,931	0,230
0,614	0,371	0,014	0,606	0,386	0,009	1,320	3,886	*55,556

0,682	0,254	0,060	0,689	0,270	0,041	1,016	5,963	*46,341
0,411	0,211	0,378	0,415	0,204	0,381	1,012	3,235	0,787
0,002	0,998	0,000	0,002	0,998	0,000	0,000	0,000	*2270,690
0,999	0,002	0,000	0,998	0,002	0,000	0,100	0,000	*99,645
0,734	0,212	0,050	0,743	0,223	0,034	1,211	4,888	*47,059

* Da a conocer porcentajes de errores altos porque son trazas o valores ínfimos dentro de la simulación, cualquiera de los valores de la simulación o bibliográfico completa el entero 1.

--- No presentan composición de esos componentes en esa línea de flujo, no presentan error.

Realizado por: ROJAS R., 2021.

CONCLUSIONES

- ✚ El proceso de deshidratación de tert-butanol usando columnas de pared divisoria azeotrópica (A-DWC) se simuló en DWSIM, donde se logró generar los resultados propuestos en la simulación, siendo estos datos tabulados para su posterior análisis estadístico, donde se determinó que su porcentaje de error máximo de un compuesto era menor al 7% y el resto correspondía a porcentajes inferiores, cabe recalcar que el modelo fue validado y además publicado en la página de DWSIM, teniendo una validación más concreta acerca de los resultados obtenidos, teniendo un error mínimo que se mantuvo dentro del rango de confiabilidad, validando el modelo simulado respecto a bibliografía.
- ✚ Se identificó que el rendimiento obtenido de la simulación de A-DWC respecto a la simulación convencional de HAD, en términos de productos obtenidos se considera lo mismo, la variación ocurre cuando se considera costos energéticos determinados en TAC, teniendo como valores en A-DWC 1.173 y convencional de 1.465 esto por (10^6 \$), además de que en la tabla 3-4., se identifica que los consumos energéticos disminuyen aprovechando las calidades de vapor en nivel energético, respecto a las columnas convencionales, cabe recalcar que no se considera los gastos en el nivel de controladores y fabricación de A-DWC, que puede aumentar su TAC, pero mejoraría la eficiencia en la producción. Adicional se incluyeron tablas del posible dimensionamiento y costos de fabricación de las 3 columnas de destilación, las tablas se detallan en el Anexo B, no se consideran estos valores respecto a la bibliografía porque en bibliografía se implementó el proyecto de plantas piloto, en la simulación de DWSIM solo se da un valor estimado de lo que podría ser en su dimensionamiento y sus costos.
- ✚ Se simuló el proceso de deshidratación de tert-butanol mediante A-DWC, considerando que es una tecnología nueva propuesta en implementación y expansión a más procesos, debido a que su disminución en el consumo energético mediante el aprovechamiento de sus corrientes lo hace factible en su aplicación, se considera que los porcentajes de obtención de tert-butanol es de 13.889 mol/s con una fracción molar de 0.999, respecto a la bibliografía es el mismo. Se considera que las gráficas de los perfiles líquidos de composición de A-DWC respecto a los detallados en bibliografía, son similares en cada columna de destilación.
- ✚ El proceso de deshidratación de tert-butanol fue validado mediante 4 parámetros, el primero se consideró la simulación y se analizó respecto a la bibliografía,

teniendo errores menores al 7% con lo cual se valida en efecto la simulación, contando con una aproximación a los datos de bibliografía sumamente altos y confiables, el segundo parámetro de validación se lo realizó mediante los cálculos manuales de balances de masa dentro de los procesos y con los datos obtenidos, teniendo congruencia en los resultados respecto a los de la simulación, como tercer análisis se consideró como validación la revisión y posterior publicación de la simulación por medio de DWSIM, teniendo con esto una verificación y validación de la simulación realizada como proyecto de titulación, por último se realizó un balance de energía en el sistema, con lo cual se pudo determinar ciertas entalpías en las diferentes corrientes, algunos valores se encuentran alejados respecto al valor calculado en la simulación, esto se debe al modelo matemático utilizado para el cálculo de los balances de energía, en este caso solo se realizó como una verificación adicional de cumplimiento con los valores obtenidos en la simulación.

RECOMENDACIONES

Para poder determinar los costos mediante la simulación es necesaria la implementación de DWSIM o algún simulador pero ya no de manera gratuita, con esto se podría obtener valores económicos determinados por la simulación y no en bibliografía, sin la necesidad de la implementación de plantas pilotos.

Se puede analizar que la implementación de las columnas de pared divisoria son nuevas tecnologías, que podrían ayudar a optimizar procesos, su TAC podría aumentar con la implementación de estas columnas respecto a medios convencionales, pero cabe considerar que sería para la automatización y control del proceso, teniendo en cuenta esto, sería que la producción aumentaría su eficacia.

Se recomienda extender el análisis y simulación de las A-DWC mediante la simulación utilizando las herramientas de controladores PID, en DWSIM ya que permiten un análisis y control más eficaz de la simulación, considerando que es un software gratuito que permitiría el desarrollo a nivel estudiantil y profesional.

BIBLIOGRAFÍA

ALI, AL-MATAR. "Selecting Fluid Packages (Thermodynamic Model) for HYSIS/Aspen Plus/ ChemCAD Process Simulators". ResearGate. [En línea], 2015, (Saudi Arabia) pp. 1-12. [Consulta: 6 enero 2020]. DOI: 10.13140/RG.2.1.3461.4487. Disponible en: https://www.researchgate.net/publication/283259774_Selecting_Fluid_Packages_Thermodynamic_Model_for_HYSIS_Aspen_Plus_ChemCAD_Process_Simulators?enrichId=rgreq-db2685b04fbf5321bcfa397ceec84a5d-XXX&enrichSource=Y292ZXJQYWdlOzI4MzI1OTc3NDtBUzoyODkxNTEyNjcxNjQyMjBAMTQ0NTk1MDQ0Mjg2Mw%3D%3D&el=1_x_2&_esc=publicationCoverPdf

ABSORPTION AND STRIPPING. 2010. [En línea]. Disponible: <https://www.cpp.edu/~tknguyen/che313/pdf/chap5-1.pdf>, <http://www.hypertvt.ethz.ch/abstrip-gasplant.php>

ÁLVAREZ, M., & GARCÍA, R. La simulación en la Industria. (Trabajo de titulación). [En línea]. Simulación de los procesos de producción en los Ingenios Azucareros. FICA – ESIC. pp. 1-162. [Consulta: 25-12-2020]. Disponible: <http://repositorio.utn.edu.ec/bitstream/123456789/1092/4/04%20ISC%20065%20Tesis.pdf>

AMIYA, K. *Chemical Process Modeling and Computer Simulation*. 2^{da} ed. New Dellhi. 2011. ISBN-978-81-203-4477-8. pp. 200-250

ASAMBLEA NACIONAL DEL ECUADOR, 2016. "Código orgánico de la economía social de los conocimientos, creatividad e innovación". Registro Oficial [en línea], vol. IV, pp. 113. [Consulta: 6 agosto 2020]. Disponible en: <http://www.wipo.int/edocs/lexdocs/laws/es/ec/ec075es.pdf>.

ASPRION, Norbert.; KAIBEL, Gerd. "Dividing Wall columns: Fundamentals and recent advances". *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*. 49 (2010), (Germany) pp. 139-146.

BOLAÑOS, Omar. Importancia de la simulación en la mejora de procesos. (Trabajo de titulación). [En línea]. Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Ingeniería. México. 2014. pp. 1-102. [Consulta el 21-11-2020]. Disponible en:

<http://www.ptolomeo.unam.mx:8080/xmlui/bitstream/handle/132.248.52.100/5884/tesis.pdf?sequence=1>

COLAN, 2020. "Process Simulation end user, the CAPE-OPEN Laboratories Network". Experience CAPE-OPEN as a Process Simulation end-user[en línea]. [Consulta: 26 julio 2020]. Disponible en: <https://www.colan.org/process-simulation-end-user/>.

CRUZ, G., & MORA, C. "Simulación del proceso de obtención de bioetanol carburante a partir del etanol azeotrópica obtenido en la planta piloto de alcohol de la FIQ-UNAP, utilizando software chemcad, en la FIQ-UNAP". (Trabajo de titulación). [En línea]. Universidad Nacional de la Amazonia Peruana. Facultad de Ingeniería Química. Perú. 2014. pp. 50-100. [Consulta: 24-12-2020]. Disponible: <https://docplayer.es/26180081-Tesis-para-optar-el-titulo-de-ingeniero-quimico-presentado-por-las-bachilleres-asesor-ing-victor-garcia-perez-iqitos-peru.html>

CHARAN, R. *Custom Unit Operations in DWSIM using Python*. [En línea]. 2018. India. Chemical Engineering Department [Consulta: 25-12-2020]. Disponible: <https://DWSIM.com>

CHEREMISINOFF, N. *Handbook of Chemical Processing Equipment*. United States of America. 2000. ISBN: 0-7506-7126-2, pp. 162-200

DISOLUCIONES. *Disoluciones*. [Blog]. [Consulta: 13-01-2021]. Disponible: https://www.ugr.es/~mota/QG_F-TEMA_5-2017-Disoluciones.pdf

DWSIM, 2020. "DWSIM -Chemical Process simulator". DWSIM Wiki [en línea]. [Consulta: 3 noviembre 2020]. Disponible en: <http://dwsim.inforside.com.br/wiki/index.php?title=Automation>.

DWSIM, 2020. Open Source Chemical Process Simulator- User Guide. [En línea]. [Consulta: 3 diciembre 2020]. Disponible en: <http://dwsim.inforside.com.br/>

EZRA, K. "Prediction of Thermal conductivity of binary azeotropic liquid mixtures". *Chemical Engineering Science*, [En línea], 1993, Great Britain. 43 (12), pp. 2307-2312. [Consulta: 15/01/2021]. ISSN: 0008-2509/93. Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/000925099380245L>

FALCETO, L. Columnas de destilación con tabique separador interno, Análisis comparativo en procesos de separación convencionales. (Trabajo de titulación). [En línea]. Universidad Politécnica de Madrid. España. 2018. pp. 60-95. [Consulta: 21-12-2020]. Disponible en: http://oa.upm.es/51888/1/TFG_LAURA_FALCETO_VINOLAS.pdf

GRACZOVÁ, E.et.al.2020. "tert-Butanol–water mixture separation by extractive distillation: Application of experimental data in process simulations". Separation and Purification Technology, pp. 116968. ISSN 13835866. DOI 10.1016/j.seppur.2020.116968.

GOBIERNO DEL ECUADOR, 2008. Decreto Ejecutivo 1014[en línea]. 2008. Quito: s.n. [Consulta: 6 agosto 2020]. ISBN 15000.000.00. Disponible en: <https://www.gobiernoelectronico.gob.ec/wp-content/uploads/2018/09/Decreto-Ejecutivo-Nº-1014-del-10-de-abril-del-2008.pdf>.

GOBIERNO ELECTRÓNICO, 2015. "Plan Nacional de Gobierno Electrónico". Gobierno Electrónico [en línea], pp. 84. [Consulta: 6 agosto 2020]. Disponible en: https://www.telecomunicaciones.gob.ec/wp-content/uploads/2018/08/PNGE_2018_2021sv2.pdf.

GNU.General Public License [blog]. 2007. [Consulta: 2020-06-01]. Disponible en: <http://www.gnu.org/licenses/gpl-3.0.htm>

HARTANTO, D. et.al. 2016. "Isobaric vapour-liquid equilibrium of (tert-butanol + water) system with biological buffer TRIS at 101.3 kPa". Journal of Chemical Thermodynamics, vol. 98, pp. 159-164. ISSN 10963626. DOI 10.1016/j.jct.2016.03.013.

HERNANDEZ, Omar; et al. "Columna de Destilación de Pared Divisoria: Caso Reactivo – Dividing Wall Distillation Column: Reactive Case". *Revista Enlace Químico*. [En línea], 2010, (México) 7 (2), pp. 64-72. [Consulta: 12 diciembre 2020]. ISSN No 04-2010-101813383300-102. Disponible en: <http://www.naturalezaytecnologia.com/index.php/nyt/article/view/145>

LEXIS, 2008. "Constitucion de la republica del Ecuador2008 Decreto Legislativo 0 Registro Oficial". Constitución del Ecuador [en línea]. S.l.: s.n., pp. 136. [Consulta: 6 agosto 2020]. Disponible en: www.lexis.com.ec.

LÓPEZ, Derly. "Criterios de selección para un agente material de separación en un proceso de deshidratación de etanol por destilación extractiva". *Procesos Separaciones no Convencionales (GPS)*. [En línea], 2018, pp. 1-11. [Consulta: 20-11-2020]. Disponible: <https://repository.uamerica.edu.co/bitstream/20.500.11839/7735/1/6121877-2018-1-IQ.pdf>

MARTINEZ, R. et al, Simulación dinámica y control de una columna de destilación de pared divisoria. *AMCA*. [En línea], 2013, (México), pp. 1-5. [Consulta: 13 noviembre 2020]. Disponible en: <https://es.scribd.com/document/300195763/Simulacion-dinamica-y-control-de-una-columna-de-destilacion-de-pared-divisoria>

MEDEIROS, Daniel. DWSIM -Open Source Process Simulator [blog]. 2008. [Consulta: 2020-06-01]. Disponible en: <https://sourceforge.net/projects/dwsim>

MEDEIROS, Daniel. DWSIM -Open Source Process Simulator Web Site [blog]. 2020. [Consulta: 2020-06-01]. Disponible en: <http://dwsim.inforside.com.br/wiki/index.php?title=DWSIM>

OLLERO, P. *Fundamentos de las operaciones de separación de transferencia de Masa*. [En línea]. 17. España. Universidad de Sevilla. 2020. [Consulta: 13-11-2020]. Disponible en: <https://dialnet.unirioja.es/servlet/libro?codigo=744398>

PETLYUK, F; et al. *Thermodynamically optimal method for separating multicomponente mixtures*. 3^{ra} ed. Union Sovietica. 1965, pp. 555-561

QI, HAN. et al, Design and analysis of an ethyl benzene production process using conventional distillation columns and dividing-wall column for multiple objectives. *Chemical Engineering Research and Design*. [En línea], 2016, (Singapore). pp. 142-157. [Consultado: 15 enero 2021]. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cherd.2016.10.046>. Disponible en: <http://www.elsevier.com/locate/cherd>

RAMIREZ, M. Desarrollo de modulos de simulación de procesos en Ingeniería Química (Trabajo de Titulación). [En línea]. Universidad del Salvador, Ingeniería y Arquitectura, Ingeniería Química. El Salvador. 2005. pp. 1-30. [Consulta: 3 diciembre 2020]. Disponible en: http://ri.ues.edu.sv/id/eprint/2142/1/Desarrollo_de_m%C3%B3dulos_de_simulaci%C3%B3n_de_procesos_en_Ingenier%C3%ADa_Qu%C3%ADmica.pdf

SANZ, Ascensión. *Alcoholes de interés industrial*. [Blog]. 2020. [Consulta: 15 noviembre 2020]. Disponible en: <https://www.eii.uva.es/organica/qoi/tema-06.php>

SCENNA, N, et al. *Integración IV – Módulos de DWSIM (II)*. [En línea]. 2018. [Consulta: 2021-01-03]. Disponible en: <https://www.modeloingenieria.edu.ar/index.php/catedras/4-ano/integracion-iv>

SHI, X, ZHAO X. et al, Energy-saving quaternary extractive distillation processes with single- or double-dividing-wall column for separation of acetone/methanol/butanone/tert-butyl alcohol, *Chemical Engineering and Processing -Process Intensification*, [En línea], 2020, (China) pp. 1-37. [Consulta: 15 Noviembre 2020] doi: <https://doi.org/10.1016/j.cep.2020.107999>. Disponible en: <https://sci-hub.se/https://doi.org/10.1016/j.cep.2020.107999>

VILLANUEVA, Á. "Métodos termodinámicos en simuladores de procesos". *Simulación y optimización de procesos químicos*. [En línea], 2010, (España), pp. 9-49. [Consulta: 13 diciembre 2020]. Disponible en: <https://www.cartagena99.com/recursos/fisica/apuntes/Metodos%20termodinamicos%20en%20simuladores%20de%20proceso%2023Feb%20.pdf>

YU, H.et.al. 2015. "Design and control of dividing-wall column for tert-butanol dehydration system via heterogeneous azeotropic distillation". *Industrial and Engineering Chemistry Research* [en línea], vol. 54, no. 13, pp. 3384-3397. [Consulta: 19 julio 2020]. ISSN 15205045. DOI 10.1021/ie504325g. Disponible en: <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ie504325g>.

ŽARKO, O, et al. *Dividing Wall Column Technology Recent Developments and Challenges*. [En línea]. 2016. [Consulta: 20 noviembre 2020]. Disponible en: https://efce.info/efce_media/-p-3050-EGOTEC-1aa6b0a8dcaa45511af92610b06af7c5.pdf

ANEXOS

ANEXO A. Resultados de proceso obtenidos en DWSIM

C-3

Resultados de la columna C-3

Columna 3				
Stream	Feed1	Feed2	Top	Bottom
Stage	1	2	1	2
Pressure (Pa)	101325	101325	101325	101325
Vapour fraction (-)	0.000000	100.000	100.000	0.000000
Temperature (K)	312.233	353.548	344.593	349.443
Enthalpy (J/kmol)	-3,66E+10	5,31E+10	4,67E+10	-3,36E+10
Entropy (J/kmol/K)	-71527.4	22524.0	23039.0	-54318.4
Total molar flow (mol/s)	883.342	105.900	100.690	935.436
Total mass flow (kg/s)	639.562	6,16E+05	665.584	589.804
Vapour std.vol.flow (m3/s)		2,51E+05	238.540	
Liquid std.vol.flow (m3/s)	0.00813973			0.00745584
Mole flows (mol/s)				
2-methyl-2-propanol	403.966	6,99E+05	413.701	688.882
Water	957.064	3,10E+05	212.102	193.981
Cyclohexane	383.670	5,00E+05	381.101	525.728
Mole fractions (-)				
2-methyl-2-propanol	0.457315	0.659696	0.410864	0.736429
Water	0.108346	0.293086	0.210648	0.207370
Cyclohexane	0.434339	0.0472179	0.378488	0.0562014
Mass flows (kg/s)				
2-methyl-2-propanol	299.428	5,18E+05	306.643	510.613
Water	0.172415	0.559144	0.382102	0.349457
Cyclohexane	322.893	0.420826	320.730	0.442448
Mass fractions (-)				
2-methyl-2-propanol	0.468176	0.840869	0.460713	0.865734
Water	0.0269583	0.0907958	0.0574086	0.0592498
Cyclohexane	0.504865	0.0683352	0.481878	0.0750161
Combined feed fractions (-)				
2-methyl-2-propanol	0.366381	0.633619	0.375210	0.624790
Water	0.235682	0.764318	0.522312	0.477688

Cyclohexane	0.884697	0.115303	0.878773	0.121227
Vapour:				
Mole weight (kg/kmol)		581.516	661.021	
Density (kg/m ³)		200.449	233.776	
Std.density (kg/m ³)		245.464	279.024	
Viscosity (N/m ² .s)		9,02E-02	8,64E-02	
Heat capacity (J/kmol/K)		101850	107259	
Thermal cond. (J/s/m/K)		0.0208149	0.0185374	
Liquid:				
Mole weight (kg/kmol)	724.025			630.510
Density (kg/m ³)	769.980			727.240
Std.density (kg/m ³)	785.729			791.063
Viscosity (N/m ² .s)	0.00119347			5,92E+00
Heat capacity (J/kmol/K)	183896			214529
Thermal cond. (J/s/m/K)	0.171254			0.220433
Surface tension (N/m)	0.0260526			0.0255131

Realizado por: ROJAS R., 2021.

C-2

Resultados de la columna C-2

Columna 2					
Stream	Feed1	V.Feed1	L.Feed1	Top	Bottom
Stage	1	1	1	1	31
Pressure (Pa)	101325	101325	101325	101325	121995
Vapour fraction (-)	1,40E-01	100.000	0.000000	100.000	0.000000
Temperature (K)	348.038	348.038	348.038	351.391	360.407
Enthalpy (J/kmol)	-3,51E+10			5,27E+10	-3,10E+10
Entropy (J/kmol/K)	-33818.8			22605.4	-30845.1
Total molar flow (mol/s)	844.440	0.00118305	844.428	705.551	138.889
Total mass flow (kg/s)	529.898	7,43E-01	529.891	426.951	102.947
Vapour std.vol.flow (m ³ /s)	2,80E-01	2,80E-01		167.146	
Liquid std.vol.flow (m ³ /s)	0.00669604		0.00669604		0.00131842
Mole flows (mol/s)					
2-methyl-2-propanol	620.387	6,56E+00	620.380	481.498	138.889
Water	179.163	2,82E+00	179.161	179.163	0
Cyclohexane	448.897	2,45E+00	448.873	448.897	5,09E-12
Mole fractions (-)					
2-methyl-2-propanol	0.734672	0.554481	0.734675	0.682442	1.000.000
Water	0.212168	0.238778	0.212168	0.253934	1,64E-03

Cyclohexane	0.0531592	0.206741	0.0531570	0.0636236	3,67E-13
Mass flows (kg/s)					
2-methyl-2-propanol	459.843	4,86E-01	459.838	356.896	102.947
Water	0.322763	5,09E-02	0.322758	0.322763	4,11E-04
Cyclohexane	0.377788	2,06E-01	0.377767	0.377788	4,28E-13
Mass fractions (-)					
2-methyl-2-propanol	0.867795	0.654447	0.867798	0.835918	100.000
Water	0.0609104	0.0684967	0.0609103	0.0755972	3,99E-04
Cyclohexane	0.0712944	0.277057	0.0712915	0.0884850	4,16E-13
Combined feed fractions (-)					
2-methyl-2-propanol	100.000	1,06E-01	0.999990	0.776125	0.223875
Water	1.000.000	1,58E-01	0.999984	1.000.000	1,27E-03
Cyclohexane	100.000	5,45E-01	0.999946	100.000	1,13E-12
Vapour:					
Mole weight (kg/kmol)	627.999	627.999		605.129	
Density (kg/m3)	219.899	219.899		209.869	
Std.density (kg/m3)	265.085	265.085		255.431	
Viscosity (N/m2.s)	8,75E-02	8,75E-02		8,83E-02	
Heat capacity (J/kmol/K)	105701	105701		105128	
Thermal cond. (J/s/m/K)	0.0195744	0.0195744		0.0204599	
Liquid:					
Mole weight (kg/kmol)	627.512		627.512		741.216
Density (kg/m3)	729.222		729.222		702.808
Std.density (kg/m3)	791.350		791.350		780.841
Viscosity (N/m2.s)	6,12E+00		6,12E+00		4,90E+00
Heat capacity (J/kmol/K)	213283		213283		262661
Thermal cond. (J/s/m/K)	0.223141		0.223141		0.103728
Surface tension (N/m)	0.0258926		0.0258926		0.0143298

Realizado por: ROJAS R., 2021.

C-1

Resultados de la columna C-1

Columna 1									
Stream	Feed2	V.Feed2	L.Feed2	Feed1	L.Feed1	Feed3	L.Feed3	Top	Bottom
Stage	1	1	1	3	3	4	4	1	6
Pressure (Pa)	1,01E+05	101.325	101325	101325	102703	101325	103392	101.325	104770
Vapour fraction (-)	0	100.000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	100.000	0.000000
Temperature (K)	3,48E+05	348.038	348.038	2,98E+05	298.150	3,12E+05	312.233	3,52E+05	3,70E+05
Enthalpy (J/kmol)	-3,51E+10			-4,55E+10		-4,30E+10		4,79E+10	-3,84E+10
Entropy (J/kmol/K)	-33818.8			-53681.7		-63918.7		20657.5	-62789.1
Total molar flow (mol/s)	938.267	1,31E+00	938.254	277.778	277.778	126.139	126.139	353.469	144.275
Total mass flow (kg/s)	0.588776	8,26E-02	0.588768	127.968	127.968	0.281861	0.281861	188.879	0.261530
Vapour std.vol.flow (m3/s)	3,11E-02	3,11E-02						0.837383	
Liquid std.vol.flow (m3/s)	7,44E+00		7,44E+00	0.00156926	0.00156926	3,03E+00	3,03E+00		2,63E+00
Mole flows (mol/s)									
2-methyl-2-propanol	689.319	7,29E-01	689.312	138.889	138.889	0.958656	0.958656	217.119	0.0288550
Water	199.070	3,14E-01	199.067	138.889	138.889	116.426	116.426	131.236	1,44E+05
Cyclohexane	0.498775	2,72E-01	0.498748	0.000000	0.000000	0.0126146	0.0126146	0.511389	3,97E-06
Mole fractions (-)									
2-methyl-2-propanol	0.734672	0.554481	0.734675	0.500000	0.500000	0.0760000	0.0760000	0.614252	0.00200000
Water	0.212168	0.238778	0.212168	0.500000	0.500000	0.923000	0.923000	0.371280	0.998000
Cyclohexane	0.0531592	0.206741	0.0531570	0.000000	0.000000	0.00100006	0.00100006	0.0144677	2,75E-07
Mass flows (kg/s)									
2-methyl-2-propanol	0.510937	5,40E-02	0.510932	102.947	102.947	0.0710575	0.0710575	160.933	0.00213879
Water	0.0358625	5,65E-03	0.0358620	0.250209	0.250209	0.209742	0.209742	0.236421	0.259392

Cyclohexane	0.0419764	2,29E-02	0.0419741	0.000000	0.000000	0.00106163	0.00106163	0.0430380	3,34E-07
Mass fractions (-)									
2-methyl-2-propanol	0.867795	0.654447	0.867798	0.804476	0.804476	0.252101	0.252101	0.852043	0.00817798
Water	0.0609104	0.0684967	0.0609103	0.195524	0.195524	0.744132	0.744132	0.125171	0.991822
Cyclohexane	0.0712944	0.277057	0.0712915	0.000000	0.000000	0.00376651	0.00376651	0.0227861	1,28E-06
Combined feed fractions (-)									
2-methyl-2-propanol	0.317063	3,35E-02	0.317060	0.638842	0.638842	0.0440949	0.0440949	0.998673	0.00132723
Water	0.0723308	1,14E-02	0.0723296	0.504643	0.504643	0.423026	0.423026	0.476836	0.523164
Cyclohexane	0.975333	5,31E-01	0.975280	0.000000	0.000000	0.0246673	0.0246673	100.000	7,76E-06
Vapour:									
Mole weight (kg/kmol)	627.999	627.999						534.357	
Density (kg/m3)	219.899	219.899						185.029	
Std.density (kg/m3)	2,65E+05	2,65E+05						2,26E+05	
Viscosity (N/m2.s)	8,75E-02	8,75E-02						9,26E-02	
Heat capacity (J/kmol/K)	105701	105701						94042.8	
Thermal cond. (J/s/m/K)	0.0195744	0.0195744						0.0209721	
Liquid:									
Mole weight (kg/kmol)	627.512		627.512	460.684	460.684	223.455	223.455		181.275
Density (kg/m3)	729.222		729.222	815.068	815.069	938.600	938.600		947.825
Std.density (kg/m3)	7,91E+05		7,91E+05	815.468	815.468	9,31E+05	9,31E+05		9,95E+05
Viscosity (N/m2.s)	6,12E+00		6,12E+00	0.00327999	0.00327999	8,97E+00	8,97E+00		2,87E+00
Heat capacity (J/kmol/K)	213283		213283	148685	148685	87566.0	87566.0		76321.8
Thermal cond. (J/s/m/K)	0.223141		0.223141	0.359035	0.359035	0.578665	0.578666		0.665051
Surface tension (N/m)	0.0258926		0.0258926	0.0458390	0.0458390	0.0658685	0.0658685		0.0595013

Realizado por: ROJAS R., 2021.

ANEXO B: Clasificación de columna rápida y costos determinados en DWSIM

C-3

Clasificación de Columna rápida C-3

Quick Column Rating			Section	1
Reference	ChemSep CO Unit Operation "C-3"		Start stage	1
Default internals	Sieve 2ft	System Factors	End stage	2
Default system factor	1	KOCH	Internal type	Sieve 2ft
Default fraction of flood	0,75		System factor	1
		Efficiencies	Flood fraction	0,75
Default efficiency	1	Duss-Taylor	Method slope equilibrium line	McCabe-Thiele
Default heigh liq. feed (m)	0,8		Efficiency estimated	0,59
		Maldistribution	HETS estimated (m)	1,017
Liq. Maldistribution (%)	5	Klemas	FPL/Maldistribution	1
Max. #/bed	35		Area fraction	1
		Product	Flow parameter	0,048
Reboiler res. times (s)	10	180	Capacity factor (m/s)	0,083
			Diameter section (m)	1,61
			Design stage	2
			Height section (m)	1,8
			Empty (m3)	0
			Diameter (m)	1,61
			Height (m)	2,89

Realizado por: ROJAS R., 2021.

Costos de columna simple C-3

Simple column costing			Shell TIC (k\$)	66
ACCR (1/year)	0,32		Internals TIC (k\$)	5
Uptime (hrs/year)	8016		Condenser TIC (k\$)	*
Materials	1	Carbon Steel	Reboiler TIC (k\$)	*
M&S Index (\$)	1600		OPEX (k\$/yr)	*
Fuel price (\$/GJ)	12	(1bbl oil = 6,1 GJ)	OPEX (k\$/yr)	*
			Total Annual.Cost (k\$/yr)	23

Realizado por: ROJAS R., 2021.

C-2

Clasificación de Columna rápida C-2

Quick Column Rating		Section		1
Reference	ChemSep CO Unit Operation "C-2"		Start stage	1
Default internals	Sieve 2ft	System Factors	End stage	30
Default system factor	1	KOCH	Internal type	Sieve 2ft
Default fraction of flood	0,75		System factor	1
		Efficiencies	Flood fraction	0,75
Default efficiency	1	Duss-Taylor	Method slope equilibrium line	McCabe-Thiele
Default height liq. feed (m)	0,8		Efficiency estimated	0,56
		Maldistribution	HETS estimated (m)	1,071
Liq. Maldistribution (%)	5	Klemas	FPL/Maldistribution	1
Max. #/bed	35		Area fraction	1
		Product	Flow parameter	0,074
Reboiler res. times (s)	10	180	Capacity factor (m/s)	0,069
			Diameter section (m)	1,51
			Design stage	11
			Height section (m)	32,4
			Empty (m3)	0
			Diameter (m)	1,51
			Height (m)	32,97

Realizado por: ROJAS R., 2021.

Costos de columna simple C-2

Simple column costing			Shell TIC (k\$)	390
ACCR (1/year)	0,32		Internals TIC (k\$)	78
Uptime (hrs/year)	8016		Condenser TIC (k\$)	*
Materials	1	Carbon Steel	Reboiler TIC (k\$)	365
M&S Index (\$)	1600		OPEX (k\$/yr)	*
Fuel price (\$/GJ)	12	(1 bbl oil = 6,1 GJ)	LPS OPEX (k\$/yr)	547
			Total Annual Cost (k\$/yr)	813

Realizado por: ROJAS R., 2021.

C-1

Clasificación de Columna rápida C-1

Quick Column Rating			Section	1	2	3
Reference	ChemSep CO Unit Operation "C-1"		Start stage	1	3	4
Default internals	Sieve 2ft	System Factors	End stage	2	3	5
Default system factor	1		Internal type	Sieve 2ft	Sieve 2ft	Sieve 2ft
Default fraction of flood	0,75	KOCH	System factor	1	1	1
		Efficiencies	Flood fraction	0,75	0,75	0,75
Default efficiency	1	Duss-Taylor	Method slope equilibrium line	McCabe- Thiele	McCabe- Thiele	McCabe- Thiele
Default heigh liq. feed (m)	0,8		Efficiency estimated	0,58	0,58	0,57
		Maldistribution	HETS estimated (m)	1,034	1,034	1,053
Liq. Maldistribution (%)	5	Klemas	FPL/Maldistribution	1	1	1
Max. #/bed	35		Area fraction	1	1	1
		Product	Flow parameter		0,055	0,057
Reboiler res. times (s)	10	180	Capacity factor (m/s)		0,09	0,089
			Diameter section (m)	0,9	0,83	0,89
			Design stage	1	3	4
			Height section (m)	1,8	1,2	2,4
			Empty (m3)	0	0	0
			Diameter (m)	0,89		
			Height (m)	5,99		

Realizado por: ROJAS R., 2021.

Costos de columna simple C-1

Simple column costing			Shell TIC (k\$)	40
ACCR (1/year)	0,32		Internals TIC (k\$)	4
Uptime (hrs/year)	8016		Condenser TIC (k\$)	*
Materials	1	Carbon Steel	Reboiler TIC (k\$)	263
M&S Index (\$)	1600		OPEX (k\$/yr)	*
Fuel price (\$/GJ)	12	(1bbl oil = 6,1 GJ)	LPS OPEX (k\$/yr)	330
			Total Annual.Cost (k\$/yr)	428

Realizado por: ROJAS R., 2021



DESIGN AND CONTROL OF DIVIDING-WALL COLUMN FOR TERT-BUTANOL DEHYDRATION SYSTEM VIA HETEROGENEOUS AZEOTROPIC DISTILLATION

ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

RICHARD CARLOS ROJAS QUINTERO

Email: richard_r9731@yahoo.com

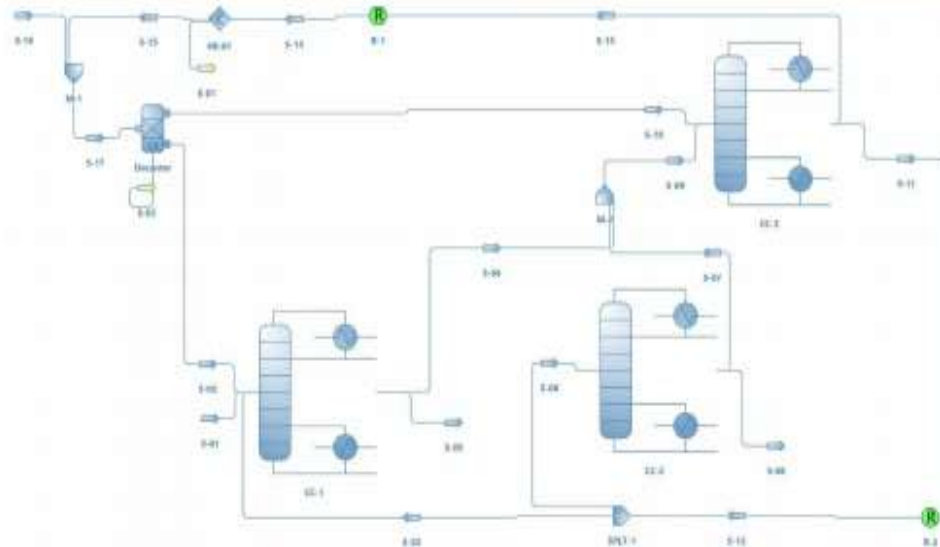
Background:

The production of tert-Butanol is used in great demand in chemical and pharmaceutical products, which is generally obtained by methods such as hydration or hydrolysis, being a product of great demand in the market in anhydrous tert-butanol, however the main difficulty that arises is the formation of a homogeneous azeotrope between t-butanol and water at atmospheric pressure. Failing to separate into pure components through ordinary distillation, azeotropic distillation being an effective method, a popular method but with a lot of energy expenditure. The tert-Butanol dehydration process using a dividing wall column process, through heterogeneous azeotropic distillation is a new technology in the development of the simulation, trying to reduce excessive energy consumption using dividing wall columns (A-DWC) for heterogeneous azeotropes.

Description of the flowsheet

The process of obtaining tert-Butanol begins with an equimolar mixture of t-butanol and water at a temperature of 298.15 K with an atmospheric pressure of 101 325 Pa, it should be noted that the entire process was carried out in SI units, in the first column (CC-1) that functions as a pre-concentrator column, in addition to an azeotropic distillation column (CC-2), in which the flow diagram generates a control loop, in which it was necessary to implement the Recycle Loops tool, so that you can run the flow diagram, in column three (CC-3) that acts as a rectifier, the energy of the first two columns is used without having a reboiler duty, achieving the reduction of energy consumption, At the end of the cycle at the head of the (CC-3) a Condenser Duty must be implemented with which it is taken to a decanter for the separation of two liquid phases, in this case it is necessary to add the drag component that is the cyclohexane, which achieves the formation of a desirable ternary azeotrope, in the decanter it is intended for the separation of an aqueous phase that is fed to (CC-1) and an organic phase that is connected to (CC-3) for rectification, it should be noted that The organic phase is the one with the highest

content of entrainment agent, for the condenser an energy of -4269.44kW was necessary, which will be removed to cool the head outlet of the column (V3), all the distillate outlets of the columns leave with a steam quality of 1, this being useful for the use of energy in the third column, reducing a reboiler in the column, an important part to consider is the output of the (CC-3), which specifies a liquid division ratio (β_L) that corresponds to the relationship between the inflow to the (CC-2) and the output from the (CC-3) with a value of 0.90, which is of utmost importance in the control of the loops of the system, we worked with a thermodynamic model NRTL, for the non-ideality of the liquid-vapor equilibrium, as products in the process in the column (CC-1) a bottom product with 0.998 in water content is obtained and in the column



Results:

Object	S-10	S-12	S-11	S-10	S-08	S-07	S-06	S-05	S-04	S-02	S-01
Temperature	298.15	336.216	333.527	312.233	366.394	333.659	333.482	371.694	353.07	312.233	298.15
Pressure	101325	101325	101325	101325	121995	101325	101325	104770	101325	101325	101325
Mass Flow	8.35146E-35	4.63983	5.99832	4.39392	132.947	4.39893	5.29899	0.391594	1.88873	0.381864	1.23908
Molar Flow	0.00111111	100.69	91.5405	86.3342	13.8889	70.1931	94.444	14.4275	25.3469	12.6139	21.7778
Volumetric Flow	1.2082E-37	2.94933	0.00718334	0.00914682	0.00144854	2.04742	0.009886246	0.000272847	1.32471	0.000280469	0.0143387
Specific Enthalpy (Mixture)	-388.675	844.237	-489.193	-488.23	-368.739	85.2347	-592.47	-3221.6	98.0709	-1897.68	-400.338
Molar Enthalpy (Mixture)	-327213	3581.39	-13472	-36973.1	-28683.7	3157.78	-3150.6	-40272.1	4959.22	-44643.7	-4289.1
Specific Enthalpy (Vapor)	0	844.237	85.2337	0	0	85.2347	85.2913	127.364	98.0709	0	0
Molar Fraction (Vapor)	0	1.53740E-05	0	0	0	1	1.40598E-05	4.48515E-10	1	0	0
Molar Fraction (Mixture) / 2-methyl-2-propanol	0	0.410884	0.730428	0.457215	1	0.682442	0.734973	0.002	0.814252	0.076	0.3
Molar Flow (Mixture) / 2-methyl-2-propanol	0	41.3701	66.8882	43.3968	13.8889	48.1498	82.0187	0.003855	21.7119	0.958058	13.8889
Molar Flow (Vapor) / 2-methyl-2-propanol	0	41.3701	0.00102533	0	0	48.1498	0.00052588	5.28729E-10	21.7119	0	0

Table N.1: Streamwise Results for Tert-Butanol Dehydration Flowsheet

ANEXO D. Certificado avalado por DWSIM por la publicación de la simulación del proceso de deshidratación de tert-butanol utilizando un proceso de columna de pared divisoria mediante destilación azeotrópica heterogénea.

**DWSIM
FLOWSHEETING PROJECT**



Certificate of Participation

This is to certify that

Richard Carlos Rojas Quintero
*from Escuela Superior Politécnica De Chimborazo, Ecuador has successfully
completed Internship under DWSIM Flowsheeting Project.
He/she has created a flowsheet titled
Dividing-Wall Column for tert-Butanol Dehydration by Heterogeneous Azeotropic Distillation
using DWSIM .The work done is available at
<https://dwsim.fossee.in/>*

Prof. Kannan Moudgalya
Principal Investigator - FOSSEE
(Free/libre and Open Source Software in Education)
IIT Bombay

ze16i







This is a computer generated certificate and requires no signature.
To verify, scan the QR code or <https://dwsim.fossee.in/flowsheeting-project/certificates/verify>



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

**DIRECCIÓN DE BIBLIOTECAS Y RECURSOS DEL APRENDIZAJE
UNIDAD DE PROCESOS TÉCNICOS Y ANÁLISIS BIBLIOGRÁFICO Y DOCUMENTAL**

REVISIÓN DE NORMAS TÉCNICAS, RESUMEN Y BIBLIOGRAFÍA

Fecha de entrega: 21/04/2021

INFORMACIÓN DEL AUTOR/A (S)
Nombres – Apellidos: Richard Carlos Rojas Quintero
INFORMACIÓN INSTITUCIONAL
Facultad: Ciencias
Carrera: Ingeniería Química
Título a optar: Ingeniero Química
f. Analista de Biblioteca responsable: Lic. Luis Caminos Vargas Mgs.

**LUIS
ALBERTO
CAMINOS
VARGAS**

Firmado digitalmente por LUIS
ALBERTO CAMINOS VARGAS
Nombre de reconocimiento (DN):
c=EC, I=RIOBAMBA,
serialNumber=0602766974, cn=LUIS
ALBERTO CAMINOS VARGAS
Fecha: 2021.04.21 17:26:31 -05'00'



0792-DBRAI-UPT-2021