



**UNIVERSIDAD MICHOACANA  
DE SAN NICOLÁS DE HIDALGO**



DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO  
FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

**SEPARACIÓN DE LA MEZCLA ETANOL/AGUA POR  
SISTEMAS REACTIVOS EN LA PRODUCCIÓN DE  
ETANOL ANHIDRO.**

TESIS presentada por:

**CARLOS EDUARDO GUZMÁN MARTÍNEZ**

A la División de Estudios de Posgrado de la Facultad  
de Ingeniería Química como requisito parcial para  
obtener el grado de:

**MAESTRO EN CIENCIAS  
EN INGENIERÍA QUÍMICA**

Asesor: Dr. Agustín Jaime Castro Montoya.

Co-asesor: Dr. Luis Ignacio Salcedo Estrada.

Morelia, Mich.

Noviembre 2016

## **ABSTRACT**

### **SEPARATION OF ETHANOL/WATER MIX BY REACTIVE SYSTEMS IN ANHYDROUS ETHANOL PRODUCTION.**

By:

Carlos Eduardo Guzmán Martínez

November 2016

Master of Science in Chemical Engineering

Supervised by: Ph.D. Agustín Jaime Castro Montoya and Ph.D. Luis Ignacio Salcedo Estrada

i

Bioethanol used as a biofuel is obtained at very low concentration. In order to be used as fuel in gas blends, over 99% weight purity is required. Therefore, highly demanding energy separation and purification process are needed. Given this fact, this work presents the simulation and comparison of number of alternative methods for ethanol dehydration due to the reaction of water with ethylene oxide and propylene oxide. These methods consist in conventional reaction-separation and intensified processes such as reactive distillation, which is expected to be low power requirement, offer an alternative value added product (ethylene glycol and propylene glycol) and capable of reducing the global process steps in anhydrous ethanol production. An economic analysis was performed. This study supports that the best dehydration process is a reactive distillation with propylene oxide on dilute conditions.

## RESUMEN

### SEPARACIÓN DE LA MEZCLA ETANOL/AGUA POR SISTEMAS REACTIVOS EN LA PRODUCCIÓN DE ETANOL ANHIDRO

Por:

Carlos Eduardo Guzmán Martínez

Noviembre 2016

Maestro en Ciencias en Ingeniería Química

Dirigida por: Dr. Agustín Jaime Castro Montoya y Dr. Luis Ignacio Salcedo Estrada  
ibqkrlos@hotmail.com

El bioetanol utilizado como biocombustible se obtiene a una concentración muy baja. Para usarlo como carburante en mezclas con gasolina, se requiere una pureza superior al 99 % en peso. Por lo tanto, se necesitan procesos de separación y purificación altamente demandantes de energía. Dada esta circunstancia, en este trabajo se simulan y comparan una serie de métodos alternativos, para la deshidratación de bioetanol, a través de la reacción del agua con óxido de etileno y óxido de propileno. Estos métodos consisten en procesos convencionales de reacción/separación y procesos intensificados, destilación reactiva, del cual se espera sean de bajos requerimientos energéticos, ofrezca un producto alterno de valor agregado (etilenglicol y propilenglicol) y sea capaz de reducir las etapas de proceso en la producción de etanol anhidro. Se realiza un análisis económico. Dicho estudio avala que el mejor proceso de deshidratación es la destilación reactiva con óxido de propileno en condiciones diluidas.

## DEDICATORIA

A mis padres, Eduardo y Griselda:

Por ser el pilar fundamental en todo lo que soy, en toda mi educación, tanto académica, como en la vida, por su apoyo incondicional perfectamente mantenido a través del tiempo.

## ÍNDICE

<b>LISTA DE TABLAS .....</b>	<b>i</b>
<b>LISTA DE FIGURAS .....</b>	<b>ii</b>
<b>NOMENCLATURA.....</b>	<b>v</b>
<b>CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN.....</b>	<b>1</b>
<b>1.1 Generalidades.....</b>	<b>1</b>
<b>1.2 Objetivo general.....</b>	<b>2</b>
<b>1.3 Objetivos específicos .....</b>	<b>2</b>
<b>1.4 Justificación.....</b>	<b>3</b>
<b>1.5 Alcance.....</b>	<b>3</b>
<b>1.6 Hipótesis .....</b>	<b>3</b>
<b>CAPÍTULO 2. MARCO TEÓRICO .....</b>	<b>4</b>
<b>2.1 Producción de Etanol.....</b>	<b>5</b>
<b>2.1.1 Concentración y rectificación de etanol contenido en caldos de cultivo.....</b>	<b>5</b>
<b>CAPÍTULO 3. ANTECEDENTES .....</b>	<b>9</b>
<b>3.1 Destilación por cambio de presión.....</b>	<b>9</b>
<b>3.2 Destilación Azeotrópica.....</b>	<b>10</b>
<b>3.3 Destilación Extractiva.....</b>	<b>11</b>
<b>3.4 Destilación Extractiva Salina.....</b>	<b>12</b>
<b>3.5 Adsorción .....</b>	<b>13</b>
<b>3.6 Pervaporación. ....</b>	<b>14</b>
<b>3.7 Destilación difusiva.....</b>	<b>16</b>
<b>3.8 Difusión de fricción.....</b>	<b>17</b>
<b>3.9 Destilación reactiva.....</b>	<b>19</b>
<b>3.10 Evaluación de procesos de deshidratación de etanol .....</b>	<b>20</b>

<b>CAPÍTULO 4. METODOLOGÍA</b> .....	21
<b>4.1 Análisis de sistemas reactivos.</b> .....	21
<b>4.2 Diseño y simulación</b> .....	22
<b>4.3 Comparación y evaluación.</b> .....	32
<b>CAPÍTULO 5. RESULTADOS</b> .....	35
<b>5.1 Selección de sistemas reactivos.</b> .....	35
<b>5.1.1 Etileno/Etanol</b> .....	35
<b>5.1.2 Óxido de Etileno/Etilenglicol</b> .....	37
<b>5.1.3 Óxido de Propileno/Propilenglicol</b> .....	39
<b>5.2 Diseño de sistemas reactivos.</b> .....	40
<b>5.2.1 Diseño y simulación del sistema etileno/etanol</b> .....	40
<b>5.2.2 Diseño del reactor en el sistema óxido de etileno/etilenglicol.</b> .....	41
<b>5.2.3 Diseño de la torre de destilación en el sistema óxido de etileno/etilenglicol.</b> .....	48
<b>5.2.4 Diseño de la destilación reactiva en el sistema óxido de etileno/etilenglicol.</b> .....	53
<b>5.2.5 Diseño del reactor en el sistema óxido de propileno/propilenglicol.</b> .....	65
<b>5.2.6 Diseño de la torre de destilación en el sistema óxido de propileno/propilenglicol.</b> .....	71
<b>5.2.7 Diseño de la destilación reactiva en el sistema óxido de propileno/propilenglicol.</b> .....	79
<b>5.3 Simulación del sistema reactor-separación óxido de etileno/etilenglicol.</b> .....	88
<b>5.4 Simulación del sistema intensificado óxido de etileno/etilenglicol.</b> .....	89
<b>5.5 Simulación del sistema reactor-separación óxido de propileno/propilenglicol.</b> .....	90
<b>5.6 Simulación del sistema intensificado óxido de propileno/propilenglicol.</b> .....	90
<b>5.7 Comparación y evaluación.</b> .....	91
<b>5.7.1 Comparación</b> .....	91
<b>5.7.2 Evaluación</b> .....	100
<b>CONCLUSIONES</b> .....	104
<b>REFERENCIAS</b> .....	105

## LISTA DE TABLAS

TABLA 4.1. VALOR ESTÁNDAR DE LAS VARIABLES EN LA FASE REACTIVA.....	25
TABLA 4.2. LÍMITE SUPERIOR E INFERIOR. ANÁLISIS PARAMÉTRICO DE LA FASE REACTIVA.....	25
TABLA 4.3. VALORES ESTÁNDAR PARA VARIABLES DE LA FASE DE SEPARACIÓN. ....	27
TABLA 4.4. LÍMITE SUPERIOR E INFERIOR. ANÁLISIS PARAMÉTRICO DE LA FASE DE SEPARACIÓN. ....	27
TABLA 4.5. VARIABLES DE LA FASE DE SEPARACIÓN. SEGUNDA TORRE .....	29
TABLA 4.6. LÍMITE SUPERIOR E INFERIOR SEGUNDA TORRE. ANÁLISIS PARAMÉTRICO DE LA FASE DE SEPARACIÓN. ....	29
TABLA 4.7. VARIABLES ESTÁNDAR DE LA DESTILACIÓN REACTIVA. ....	31
TABLA 4.8. LÍMITE SUPERIOR E INFERIOR DE LA DESTILACIÓN REACTIVA .....	31
TABLA 4.9. PRECIOS DE REACTIVOS Y PRODUCTOS.....	33
TABLA 5.1. DATOS CINÉTICOS HIDRATACIÓN DE ETILENO.....	36
TABLA 5.2. DATOS CINÉTICOS ÓXIDO DE ETILENO. ....	38
TABLA 5.3. DATOS CINÉTICOS ÓXIDO DE PROPILENO.....	39
TABLA 5.4. VALORES FINALES PARA LOS REACTORES EN DISTINTAS CONFIGURACIONES.....	48
TABLA 5.5. VALORES FINALES PARA LAS COLUMNAS DE DESTILACIÓN A DISTINTAS CONFIGURACIONES .....	53
TABLA 5.6. VALORES FINALES PARA LOS SISTEMAS DE DESTILACIÓN REACTIVA A DISTINTAS CONFIGURACIONES.....	64
TABLA 5.7. VALORES FINALES PARA LOS REACTORES EN DISTINTAS CONFIGURACIONES.....	71
TABLA 5. 8. VALORES FINALES PARA LAS COLUMNAS DE DESTILACIÓN A DISTINTAS CONFIGURACIONES .....	78
TABLA 5.9. VALORES FINALES PARA LOS SISTEMAS DE DESTILACIÓN REACTIVA A DISTINTAS CONFIGURACIONES.....	88
TABLA 5.10. SIMULACIÓN DE LOS SISTEMAS CONVENCIONALES CON ÓXIDO DE ETILENO. ....	89
TABLA 5.11. SIMULACIÓN DESTILACIÓN REACTIVA CON ÓXIDO DE ETILENO. ....	89
TABLA 5.12. SIMULACIÓN DE LOS SISTEMAS CONVENCIONALES CON ÓXIDO DE PROPILENO.....	90
TABLA 5.13. SIMULACIÓN DESTILACIÓN REACTIVA CON ÓXIDO DE PROPILENO.....	91
TABLA 5.14. RESULTADOS ECONÓMICOS DESTILACIÓN REACTIVA ÓXIDO DE ETILENO. ....	92
TABLA 5.15. RESULTADOS ECONÓMICOS PROCESO CONVENCIONAL ÓXIDO DE ETILENO. ....	93
TABLA 5.16. RESULTADOS ECONÓMICOS PROCESO CONVENCIONAL ÓXIDO DE PROPILENO.....	94
TABLA 5.17. RESULTADOS ECONÓMICOS DESTILACIÓN REACTIVA ÓXIDO DE PROPILENO.....	95
TABLA 5.18. PUREZA DE ETANOL. PORCENTAJE MOL. ....	96
TABLA 5.19. RECUPERACIÓN DE ETANOL. PORCENTAJE MOL.....	96
TABLA 5.20. EMISIÓN DE CO <sub>2</sub> POR SERVICIOS.....	97
TABLA 5.21. COSTO TOTAL DE SERVICIOS.....	97
TABLA 5.22. COSTO DE CAPITAL.....	98
TABLA 5.23. COSTO DE OPERACIÓN.....	98
TABLA 5.24. VENTA PRODUCTO.....	99
TABLA 5.25. GANANCIA.....	99

## LISTA DE FIGURAS

FIGURA 2.1. PRODUCCIÓN GLOBAL DE ETANOL ANHIDRO.....	4
FIGURA 2.2 DIAGRAMA GENERAL DE LA ESTRUCTURA DE PRODUCCIÓN DE ETANOL.....	7
FIGURA 3.1. DIAGRAMA DE DESHIDRATACIÓN POR CAMBIO DE PRESIÓN. ....	9
FIGURA 3.2. DIAGRAMA DE PRODUCCIÓN DE ETANOL Y DESHIDRATACIÓN AZEOTRÓPICA CON BENCENO.....	10
FIGURA 3.3. DIAGRAMA DE PRODUCCIÓN DE ETANOL Y DESHIDRATACIÓN CON DESTILACIÓN EXTRACTIVA UTILIZANDO ETILENGLICOL COMO SOLVENTE.....	12
FIGURA 3.4. DIAGRAMA DE PRODUCCIÓN DE ETANOL Y DESHIDRATACIÓN POR MEDIO DE ADSORCIÓN. .....	14
FIGURA 3.5. DIAGRAMA DE DESHIDRATACIÓN DE ETANOL POR PERVAPORACIÓN.....	16
FIGURA 3.6. PRINCIPIO DE LA DESTILACIÓN DIFUSIVA .....	17
FIGURA 3.7. PRINCIPIO DE LA SEPARACIÓN DIFUSIÓN DE FRICCIÓN. ....	18
FIGURA 3.8. ESQUEMA DE UNA DESTILACIÓN REACTIVA.....	20
FIGURA 4.1. SISTEMAS REACTIVOS PARA ÓXIDO DE ETILENO Y ÓXIDO DE PROPILENO.....	24
FIGURA 4.2. SISTEMA REACTIVO PARA HIDRATACIÓN DE ETILENO.....	24
FIGURA 4.3 PROCESO DE SEPARACIÓN PARA ÓXIDO DE PROPILENO.....	26
FIGURA 4.4. PROCESO DE SEPARACIÓN PARA ÓXIDO DE ETILENO. ....	26
FIGURA 4.5. DESTILACIÓN REACTIVA ÓXIDO DE ETILENO.....	30
FIGURA 4.6. DESTILACIÓN REACTIVA ÓXIDO DE PROPILENO. ....	30
FIGURA 5.1. ANÁLISIS DE LA MEZCLA DE REACTIVOS Y PRODUCTOS PARA LA HIDRATACIÓN DE ETILENO. .....	37
FIGURA 5.2. ANÁLISIS DE LA MEZCLA DE REACTIVOS Y PRODUCTOS PARA LA REACCIÓN CON ÓXIDO DE ETILENO.....	38
FIGURA 5.3. ANÁLISIS DE LA MEZCLA DE REACTIVOS Y PRODUCTOS PARA LA REACCIÓN CON ÓXIDO DE ETILENO.....	40
FIGURA 5.4. DISEÑO DEL SISTEMA ETILENO / ETANOL.....	41
FIGURA 5.5. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD FLUJO DE ENTRADA ÓXIDO DE ETILENO RSEEO2080. ....	41
FIGURA 5.6. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD PRESIÓN RSEEO2080.....	42
FIGURA 5.7. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD TEMPERATURA RSEEO2080.....	43
FIGURA 5.8. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD TIEMPO DE RESIDENCIA RSEEO2080.....	43
FIGURA 5.9. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD FLUJO DE ENTRADA ÓXIDO DE ETILENO RSEEO9010. ....	44
FIGURA 5.10. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD PRESIÓN RSEEO9010.....	44
FIGURA 5.11. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD TEMPERATURA RSEEO9010.....	45
FIGURA 5.12. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD TIEMPO DE RESIDENCIA RSEEO9010.....	45
FIGURA 5.13. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD FLUJO DE ENTRADA ÓXIDO DE ETILENO RSEEO964. ....	46



FIGURA 5.14. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD PRESIÓN RSEEO964.....	46
FIGURA 5.15. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD TEMPERATURA RSEEO9604.....	47
FIGURA 5.16. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD TIEMPO DE RESIDENCIA RSEEO964.....	47
FIGURA 5.17. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD ETAPA DE ALIMENTACIÓN RSEEO2080.....	48
FIGURA 5. 18. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD FLUJO DESTILADO RSEEO2080.....	49
FIGURA 5.19. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD RELACIÓN DE REFLUJO RSEO2080.....	49
FIGURA 5.20. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD ETAPA DE ALIMENTACIÓN RSEEO9010.....	50
FIGURA 5.21. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD FLUJO DE DESTILADO RSEEO9010.....	50
FIGURA 5.22. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD RELACIÓN DE REFLUJO RSEEO9010.....	51
FIGURA 5.23. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD ETAPA DE ALIMENTACIÓN RSEEO964.....	51
FIGURA 5.24. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD FLUJO DE DESTILADO RSEEO964.....	52
FIGURA 5.25. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD RELACIÓN DE REFLUJO RSEEO964.....	52
FIGURA 5.26. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD ETAPA DE ENTRADA RDEO2080.....	54
FIGURA 5.27. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD FLUJO DE DESTILADO RDEO2080.....	54
FIGURA 5.28. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD FLUJO DE ENTRADA ÓXIDO DE ETILENO RDEO2080.....	55
FIGURA 5.29. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD HOLD UP RDEO2080.....	56
FIGURA 5.30. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD PRESIÓN RDEO2080.....	56
FIGURA 5.31. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD RELACIÓN DE REFLUJO RDEO2080.....	57
FIGURA 5.32. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD FLUJO DE ENTRADA ÓXIDO DE ETILENO RDEO9010.....	58
FIGURA 5.33. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD ETAPA DE ALIMENTACIÓN RDEP9010.....	58
FIGURA 5.34. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD FLUJO DE DESTILADO RDEO9010.....	59
FIGURA 5.35. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD HOLD UP RDEO9010.....	59
FIGURA 5.36. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD PRESIÓN RDEO9010.....	60
FIGURA 5.37. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD RELACIÓN DE REFLUJO RDEO9010.....	60
FIGURA 5.38. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD FLUJO DE ENTRADA ÓXIDO DE ETILENO RDEO964.....	61
FIGURA 5.39. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD ETAPA DE ALIMENTACIÓN RDEO964.....	61
FIGURA 5.40. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD FLUJO DE DESTILADO RDEO964.....	62
FIGURA 5.41. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD HOLD UP RDEO964.....	62
FIGURA 5.42. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD PRESIÓN RDEO964.....	63
FIGURA 5.43. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD RELACIÓN DE REFLUJO RDEO964.....	63
FIGURA 5.44. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD FLUJO DE ENTRADA ÓXIDO DE PROPILENO RSEPO2080...	65
FIGURA 5.45. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD PRESIÓN RSEPO2080.....	66
FIGURA 5.46. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD TEMPERATURA RSEPO2080.....	66
FIGURA 5.47. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD TIEMPO DE RESIDENCIA RSEPO2080.....	67
FIGURA 5.48. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD FLUJO DE ENTRADA ÓXIDO DE PROPILENO RSEPO9010...	68
FIGURA 5.49. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD PRESIÓN RSEPO9010.....	68
FIGURA 5.50. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD TEMPERATURA RSEPO9010.....	69
FIGURA 5.51. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD TIEMPO DE RESIDENCIA RSEPO9010.....	69
FIGURA 5.52. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD FLUJO DE ENTRADA ÓXIDO DE PROPILENO RSEPO964....	70
FIGURA 5.53. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD TEMPERATURA RSEPO964.....	70
FIGURA 5.54. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD TIEMPO DE RESIDENCIA RSEPO964.....	71
FIGURA 5.55. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD ETAPA DE ALIMENTACIÓN TORRE 1 RSEPO2080.....	72
FIGURA 5.56. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD ETAPA DE ALIMENTACIÓN TORRE 2 RSEPO2080.....	72
FIGURA 5.57. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD RELACIÓN DE REFLUJO TORRE 1 RSEPO2080.....	73

FIGURA 5.58. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD RELACIÓN DE REFLUJO TORRE 2 RSEPO2080.....	73
FIGURA 5.59. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD FLUJO DE DESTILADO TORRE 1 RSEPO2080. ....	74
FIGURA 5.60. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD FLUJO DE DESTILADO TORRE 2 RSEPO2080. ....	74
FIGURA 5.61. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD ETAPA DE ALIMENTACIÓN TORRE 1 RSEPO9010. ....	75
FIGURA 5.62. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD ETAPA DE ALIMENTACIÓN TORRE 2 RSEPO9010. ....	75
FIGURA 5.63. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD FLUJO DE DESTILADO TORRE 1 RSEPO9010. ....	76
FIGURA 5.64. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD FLUJO DE DESTILADO TORRE 2 RSEPO9010.....	76
FIGURA 5.65. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD RELACIÓN DE REFLUJO TORRE 1 RSEPO9010.....	77
FIGURA 5.66. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD RELACIÓN DE REFLUJO TORRE 2 RSEPO9010.....	77
FIGURA 5.67. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD FLUJO DE ENTRADA ÓXIDO DE PROPILENO RDPO2080.....	79
FIGURA 5.68. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD ETAPA DE ALIMENTACIÓN RDPO2080. ....	80
FIGURA 5.69. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD FLUJO DE DESTILADO RDPO2080. ....	80
FIGURA 5.70. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD HOLD-UP RDPO2080.....	81
FIGURA 5.71. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD PRESIÓN RDPO2080. ....	81
FIGURA 5.72. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD RELACIÓN DE REFLUJO RDPO2080. ....	82
FIGURA 5.73. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD FLUJO DE ENTRADA ÓXIDO DE PROPILENO RDPO9010. ....	83
FIGURA 5.74. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD FLUJO DE DESTILADO RDPO9010. ....	83
FIGURA 5.75. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD HOLD-UP RDPO9010.....	84
FIGURA 5.76. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD PRESIÓN RDPO9010. ....	84
FIGURA 5.77. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD RELACIÓN DE REFLUJO RDPO9010. ....	85
FIGURA 5.78. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD FLUJO DE ENTRADA ÓXIDO DE PROPILENO RDPO964. ....	85
FIGURA 5.79. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD FLUJO DE DESTILADO RDPO964.....	86
FIGURA 5.80. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD HOLD-UP RDPO964.....	86
FIGURA 5.81. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD PRESIÓN RDPO964. ....	87
FIGURA 5.82. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD RELACIÓN DE REFLUJO RDPO964. ....	87

## NOMENCLATURA

- RDEO2080: Destilación reactiva, óxido de etileno, 20 % mol agua – 80 % mol etanol.
- RDEO9010: Destilación reactiva, óxido de etileno, 90 % mol agua – 10 % mol etanol.
- RDEO964: Destilación reactiva, óxido de etileno, 96 % mol agua – 4 % mol etanol.
- RDPO2080: Destilación reactiva, óxido de propileno, 20 % mol agua – 80 % mol etanol.
- RDPO9010: Destilación reactiva, óxido de propileno, 90 % mol agua – 10 % mol etanol.
- RDPO964: Destilación reactiva, óxido de propileno, 96 % mol agua – 4 % mol etanol.
- RSEEO2080: Reactor / torre destilación, óxido de etileno, 20 % mol agua – 80 % mol etanol.
- RSEEO9010: Reactor / torre destilación, óxido de etileno, 90 % mol agua – 10 % mol etanol.
- RSEEO964: Reactor / torre destilación, óxido de etileno, 96 % mol agua – 4 % mol etanol.
- RSEPO2080: Reactor / torre destilación, óxido de propileno, 20 % mol agua – 80 % mol etanol.
- RSEPO9010: Reactor / torre destilación, óxido de propileno, 90 % mol agua – 10 % mol etanol.
- RSEPO964: Reactor / torre destilación, óxido de propileno, 96 % mol agua – 4 % mol etanol.
- RREE2080: Reactor flujo pistón, etileno, 20 % mol agua – 80 % mol etanol.
- RREE9010: Reactor flujo pistón, etileno, 90 % mol agua – 10 % mol etanol.
- RREE964: Reactor flujo pistón, etileno, 96 % mol agua – 4 % mol etanol.
- Temp: Temperatura.
- Vapor: Vapor de agua.

- Kw: Kilo Watt.
- USD: Dólar estadounidense.
- Et: Etanol.
- PO: Óxido de propileno.
- EO: Óxido de etileno.
- PG: Propilenglicol.
- EG: Etilenglicol.
- r: Velocidad de reacción.
- k: Constante cinética de reacción.
- $C_{PO}$ : Concentración molar óxido de propileno.
- $C_{PG}$ : Concentración molar propilenglicol.
- $C_W$ : Concentración molar agua.
- $X_{EO}$ : Fracción mol óxido de etileno.
- $X_{EG}$ : Fracción mol etilenglicol.
- $X_W$ : Fracción mol agua.
- T: Temperatura.
- $P_W$ : Presión parcial del agua.
- $P_A$ : Presión parcial del etanol.
- $P_E$ : Presión parcial del etileno.

## AGRADECIMIENTOS

**A:**

**Dios.** Por haberme permitido llegar hasta este punto y haberme dado salud para lograr mis objetivos, además de su infinita bondad y amor.

**Mi familia.** Por haberme apoyado en todo momento, por sus consejos, sus valores, por la motivación constante que me ha permitido ser una persona de bien, pero más que nada, por su amor.

**Dr. Agustín Jaime Castro Montoya.** Por haberme guiado y apoyado en innumerables ocasiones durante todo este proceso. Además de haber compartido su conocimiento conmigo.

**Mis profesores y asesores.** Por haberme tenido mucha paciencia y formarme con la gran calidad académica y humana que los caracteriza.

**CONACyT.** Por el financiamiento de mi posgrado.

**UMSNH.** Por proporcionarme los recursos materiales y humanos para poder lograr este posgrado.

**Mis compañeros de generación.** Javier Tovar, José Meza, Francisco Hernández, Lupita Morales, Omar Campuzano, Luis Alberto Díaz por haberme brindado su amistad, compartido conocimiento y regalado grandes momentos juntos.

**Mis amigos.** José M. Carlos Pérez, Melina Velazco y todos aquellos que han estado a mi lado.

## CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN

### 1.1 Generalidades

La mitigación del cambio climático, el abastecimiento de energía y la seguridad alimentaria son algunas de las principales metas globales que enfrenta el mundo de hoy. Una de las opciones reales para lograr gran parte de esas metas es el desarrollo de fuentes de energía renovables y más limpias, tales como los biocombustibles. El etanol de la caña de azúcar y del maíz es el biocombustible más importante a nivel mundial (Cardona et al 2010), seguido por el biodiesel de las semillas de canola.

La gran mayoría de etanol utilizado como combustible es producido por procesos de fermentación. Sin embargo, en la mayoría de procesos de producción de etanol, aparece una mezcla de etanol/agua. En este caso, el proceso de destilación ha sido comúnmente utilizado para la purificación de etanol. Desafortunadamente, al llegar a una concentración aproximada del 95% de etanol tenemos un azeótropo etanol/agua que limita el proceso de purificación y consecuentemente no puede ser logrado con una sola destilación (Cardona et al, 2010).

Existen diversas alternativas para eliminar el azeótropo y lograr la deshidratación del etanol como lo son:

- Destilación por cambio de presión.
- Destilación azeotrópica.
- Destilación extractiva.
- Adsorción.
- Pervaporación.
- Difusión de fricción.
- Destilación difusiva.

Además, existen diversas desventajas en la aplicación de cada uno de estos procesos de deshidratación.

La separación por sistemas reactivos consiste en consumir el agua de la mezcla azeotrópica etanol/agua con algún agente reactante. El fin es llevar a cabo la

deshidratación del etanol y obtener algún compuesto, como producto secundario de valor agregado.

Mediante el logro del diseño de un sistema reactivo, se presentarían las siguientes ventajas:

- La simplificación del proceso global de producción de etanol anhidro. Lo que contribuye a la disminución de los costos capital.
- Eliminar el azeótropo de la mezcla objetivo.
- Generación de productos alternos de valor agregado dependiendo el sistema a utilizar.
- Beneficio de la integración de energética.

### **1.2 Objetivo general**

Proponer mediante simulación utilizando Aspen Plus un método alternativo para la deshidratación del bioetanol. Con este proceso se espera obtener bajos requerimientos energéticos, adquirir un producto adicional de interés industrial y disminuir el procedimiento global industrial.

### **1.3 Objetivos específicos**

- Plantear un proceso intensificado basado en la destilación reactiva con distintos reactivos.
- Plantear un sistema reactivo convencional, distinto a la destilación reactiva, basado en la necesidad del proceso.
- Proponer los parámetros adecuados para la operación de cada sistema.
- Evaluar cada proceso de separación reactiva.
- Proponer la mejor opción en la separación reactiva de etanol anhidro en base al costo e intensificación del proceso.

### **1.4 Justificación**

Al llevar a cabo este proyecto, se desea satisfacer la necesidad que se tiene en la actualidad por un producto de alta pureza. Realizando un proceso innovador y eficiente que aumente la rentabilidad de las tecnologías aplicadas y ofrezca productos de calidad a un mercado alterno.

### **1.5 Alcance**

El alcance de este proyecto es realizar una evaluación técnica y económica, basada en los datos obtenidos en la simulación en Aspen Plus, de los diferentes sistemas reactivos propuestos para la separación de la mezcla azeotrópica etanol/agua y proponer la más rentable.

### **1.6 Hipótesis**

Al realizar un proceso reactivo con el azeótropo etanol/agua, se producirá etanol anhidro y un producto adicional de valor agregado. Obteniendo ventajas sobre los métodos de deshidratación convencionales reportados al simplificar el proceso global.

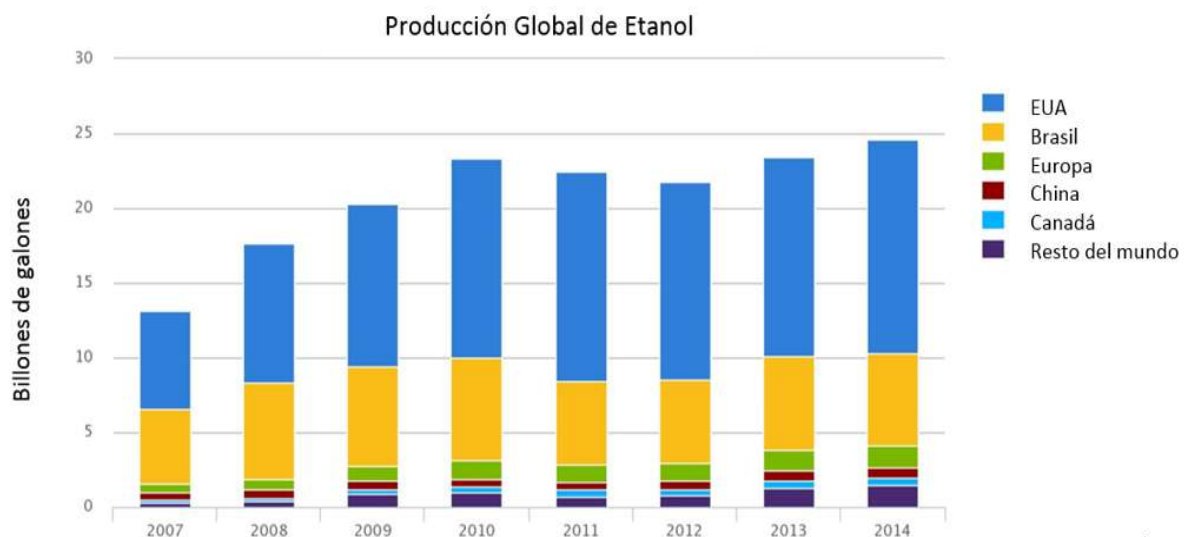


## CAPÍTULO 2. MARCO TEÓRICO

El mundo está frecuentemente enfrentando a dos problemas significantes; la demanda en aumento de combustibles fósiles y la degradación ambiental. Los problemas están continuamente siendo exacerbados por el incremento de la población global y el aumento en el consumo de energía per cápita. Para superar los problemas, la energía renovable ha estado recibiendo un incremento de atención debido a la variedad de beneficios ambientales, económicos y sociales que presenta (Cardona et al 2010).

La producción de combustible de etanol se ha incrementado extraordinariamente debido a que muchos países buscan reducir las importaciones de petróleo, impulsar las economías rurales y mejorar la calidad del aire.

En la Figura 2.1 (Renewable Fuels Association, 2015), se muestra la producción global de etanol por región, desde 2007 hasta 2013. La producción global alcanzó su punto máximo en 2013 después de una disminución en 2011 y 2012. Estados Unidos es el mayor productor mundial de etanol, con una producción sobre 13 billones de galones en 2013. Brasil y Estados Unidos producen el 84% de etanol a nivel mundial (Cardona et al 2010).



**Figura 2.1. Producción global de etanol anhidro.**

El etanol puede ser obtenido sintéticamente del carbón y gas natural. El mayor productor de este tipo de alcohol es Sudáfrica. También, el alcohol puede ser obtenido por la oxidación de olefinas. Aunque, el 95% del etanol mundial es obtenido por la fermentación de materia prima con carbohidratos. La fermentación del etanol se produce por lotes (Cardona et al 2010).

### **2.1 Producción de Etanol.**

El uso de combustible de etanol como una gasolina oxigenada requiere una elevada pureza de etanol, por eso es necesario concentrar el etanol hasta 99% de pureza para obtener el etanol Anhidro. El cuál es la forma compatible usada para las mezclas de etanol-gasolina. Porque la presencia del agua en el combustible de etanol puede traer fallas en el motor durante la combustión de dichas mezclas.

El primer paso del esquema global, representado en la Figura 2.2, de recuperación del etanol es la concentración de etanol contenido en los medios de cultivo. Este proceso es llevado a cabo en columnas de destilación obteniendo contenidos de etanol cercanos al 50%. El siguiente paso es la rectificación de la corriente concentrada para obtener un producto con una composición cerca de la mezcla azeotrópica de etanol/agua (Cardona et al 2010).

#### **2.1.1 Concentración y rectificación de etanol contenido en caldos de cultivo.**

El caldo de cultivo puede tener o no células de levaduras u otro microorganismo productor de etanol. Esta corriente es llamada mosto fermentado si es proveniente de azúcar de caña, pasta fermentada si es utilizado algún grano.

Además del etanol y las materias primas empleadas se pueden encontrar otras sustancias en el caldo de cultivo tales como

- Azucares no fermentados
- Oligosacáridos resultantes de la sacarificación incompleta del almidón o celulosa
- Tierra o granos de cereal desgastados

- Lignina
- Otros productos de fermentación como glicerol
- Ácido láctico producido por bacterias contaminantes
- Pequeñas cantidades de ácido acético liberado durante la hidrólisis de hemicelulosa.
- Dióxido de carbono, sales y productos excreta provenientes del metabolismo celular disueltos
- Otros componentes y materiales.

De manera que, los dos principales componentes son agua 80-90% y etanol. Haciendo uso de la alta volatilidad y bajo punto de ebullición del etanol, la operación unitaria utilizada como una regla para su separación es la destilación convencional a presión igual o mayor a la atmosférica.

Usualmente, dos columnas de destilación son utilizadas para elevar la concentración del etanol de 90 a 92%. Concentraciones mayores a 95.6 % son imposible de obtener por la destilación convencional debido a que la composición es similar tanto en el vapor saturado y el líquido saturado obtenido en los extremos de la columna de destilación. Esta composición es nombrada azeotrópica y es uno de los principales límites termodinámicos impuestos sobre los procesos de purificación del etanol. Para producir etanol Anhidro (concentración 99.5% o mayor) se requiere separaciones no convencionales.

Durante la fermentación, dióxido de carbono es generado como resultado del metabolismo microbiano. En la corriente de salida del gas y acompañado con CO<sub>2</sub> pueden ser encontradas pequeñas cantidades de etanol volatilizado, agua y otras sustancias volátiles. Para evitar la pérdida de etanol, esta corriente gaseosa es alimentada a un depurador donde una corriente de agua a contracorriente absorbe más del 98% de etanol. El depurador es llenado con una cama empacada plástica favoreciendo el contacto entre la corriente gaseosa y la líquida.

La corriente gaseosa de desecho es liberada a la atmósfera mientras que la corriente líquida conteniendo alrededor de 2.5 % de etanol es regresada a la corriente

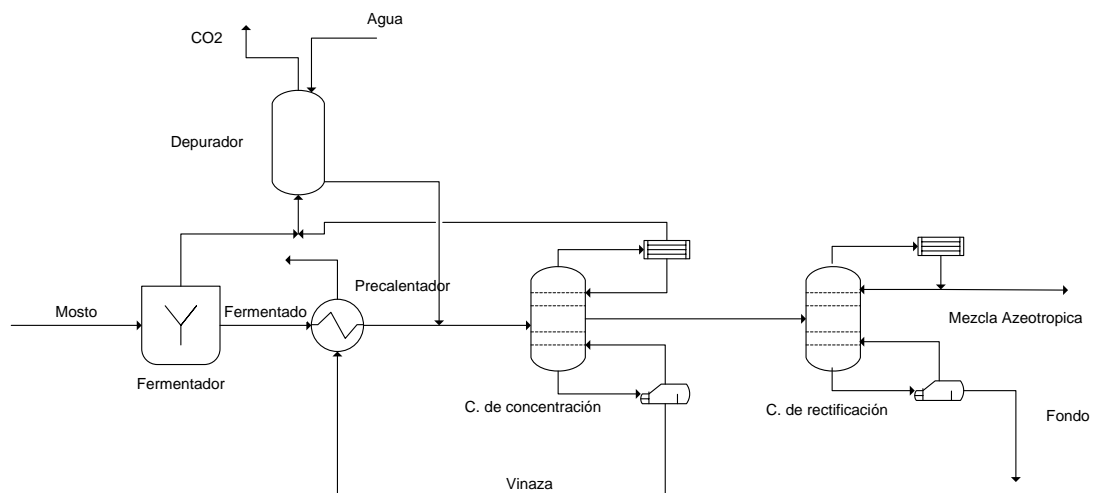
con el caldo de cultivo proveniente del fermentador para ser alimentado a la torre de destilación.

La primera columna de destilación es llamada columna de concentración. Esta columna tiene un determinado número de platos que pueden ser de varios tipos. La corriente de etanol concentrada (35 a 50%) es removida desde la columna por la corriente lateral. Los vapores de la cabeza de la columna contienen principalmente CO<sub>2</sub> aproximadamente 84% una significativa cantidad de etanol 12 % y una pequeña cantidad de agua.

El fondo de la columna, llamado “vinaza” concentra la sustancia no volátil y sólido suspendida que se encuentran en el caldo de cultivo.

La composición de la vinaza depende de la alimentación empleada para la producción de etanol. El calor de la corriente de fondo es utilizado para precalentamiento de la corriente de alimentación de la misma columna de destilación.

Esta columna tiene 32 platos, la corriente de alimentación es aplicada en el cuarto plato de la parte superior, la corriente lateral de etanol es removida del octavo plato y la tasa de reflujo requerida es de 6.1 (véase Figura 2.2).



**Figura 2.2 Diagrama general de la estructura de producción de etanol.**

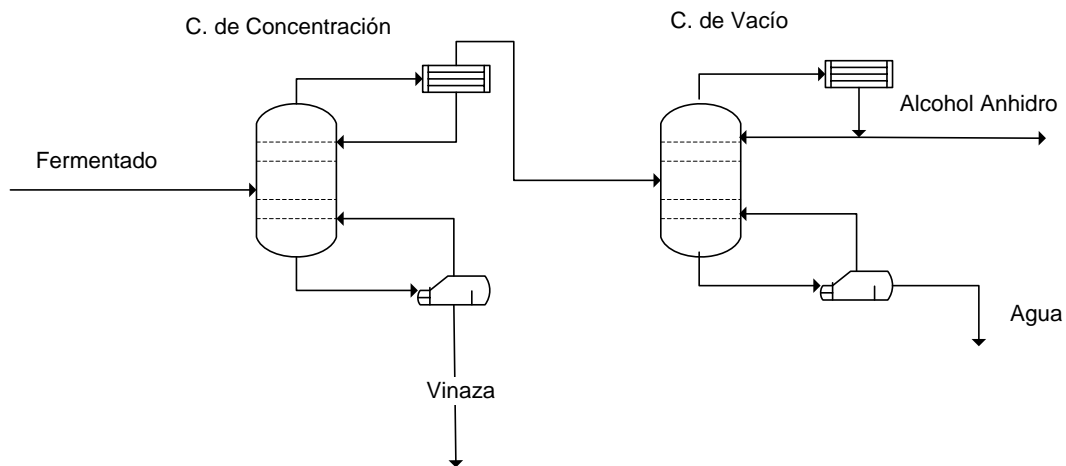
La segunda columna o columna de rectificación es alimentada con la corriente lateral de etanol desde la columna de concentración. La operación de esta columna permite un destilado con 90 a 92 % de concentración de etanol, la cual es enviada a la etapa de deshidratación. El fondo de esta columna tiene muy poco contenido de etanol. Menos del 1 % siendo principalmente agua. La columna tiene 69 platos y una corriente de alimentación adicional correspondiente a la corriente de recirculación proveniente de la etapa de deshidratación, la cual es alimentada en el plato 19 de la parte superior. La corriente de alimentación de la columna de concentración es aplicada en el plato 40 y la tasa de reflujo requerida es de 3.2 (Cardona et al 2010).

### CAPÍTULO 3. ANTECEDENTES

En la actualidad existen distintas operaciones para la deshidratación de la mezcla azeotrópica etanol/agua como lo son: la destilación por cambio de presión, destilación azeotrópica, destilación extractiva y extractiva salina, adsorción, pervaporación, destilación difusiva y difusión de fricción. Dichos procesos son descritos a lo largo de este capítulo.

#### **3.1 Destilación por cambio de presión.**

Para lograr la separación de la mezcla azeotrópica usando la destilación por cambio de presión, Figura 3.1, es requerida la manipulación de la presión de la columna utilizando una segunda columna trabajando bajo condiciones de vacío. Este tipo de destilación hace un cambio en el equilibrio de la fase vapor líquido a presiones menores que la atmosférica permitiendo la desaparición del azeótropo. La presión requerida para eliminar el azeótropo en las mezclas etanol agua es menor a 6 kPa. Pero para obtener una gran pureza en el producto, las columnas de destilación necesitan un gran número de platos (sobre 40) y una tasa de reflujo grande. Estas condiciones implican costos de capital significativos e incrementos en el costo de la energía debido al mantenimiento del vacío en las torres de destilación con muchos platos.



**Figura 3.1. Diagrama de deshidratación por cambio de presión.**

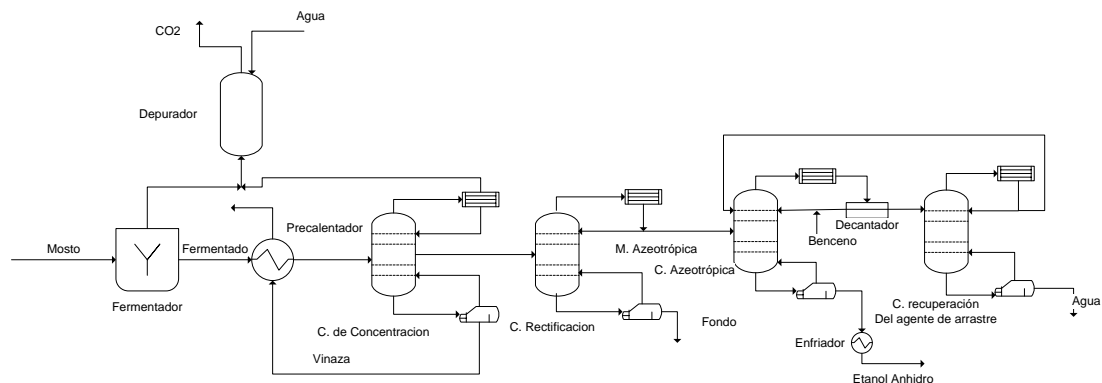
En general, la destilación por cambio de presión no puede ser empleada siempre; su utilización es limitada a mezclas con azeótropos susceptibles a ser desplazados con pequeños cambios de presión, el cual no es el caso de los sistemas de etanol/agua (Palomino and Parientes 2013).

### **3.2 Destilación Azeotrópica**

Esta tecnología, Figura 3.2, consiste en la adición de un agente de arrastre a la mezcla de etanol/agua para formar un nuevo azeótropo. El azeótropo (ternario) permite una separación más sencilla que involucra dos o tres columnas de destilación. Las sustancias más utilizadas en este proceso son *benceno*, *tolueno*, *n pentano* y *ciclo hexano*.

En el caso del benceno, el proceso consta de una columna de deshidratación (azeotrópica), la cual es alimentada con la mezcla que contiene 90-92% de etanol proveniente de la columna de rectificación. El benceno es añadido en el plato superior.

Para la parte más baja de la columna azeotrópica, el etanol es removido con un contenido de agua menor a 1%. Los vapores de la parte superior de la columna corresponden a una mezcla con una composición igual o cerca de la composición del azeótropo ternario de etanol agua benceno. Esta mezcla es condensada y enviada a un separador líquido/líquido, un decantador.



**Figura 3.2. Diagrama de producción de etanol y deshidratación azeotrópica con benceno.**

Debido a las propiedades de la mezcla del azeótropo ternario, es condensado y separado en dos fases líquidas; la fase con alto contenido en benceno es recirculada como un reflujo a la columna azeotrópica y la otra fase con un mayor contenido de agua que es alimentado a una columna menor para recuperar el agente de arrastre. El destilado proveniente de la columna de extracción tiene una concentración significativa de benceno y por esta razón, esta corriente es recirculada a la columna azeotrópica o al decantador. Los fondos de la columna de extracción contienen principalmente agua. Si estos fondos tienen una cantidad importante de etanol, ellos son recirculados a la columna de concentración; de esta manera la separación del agua y el etanol es atacada y el agente de arrastre es recuperado (Kiss and Suszwalak 2012).

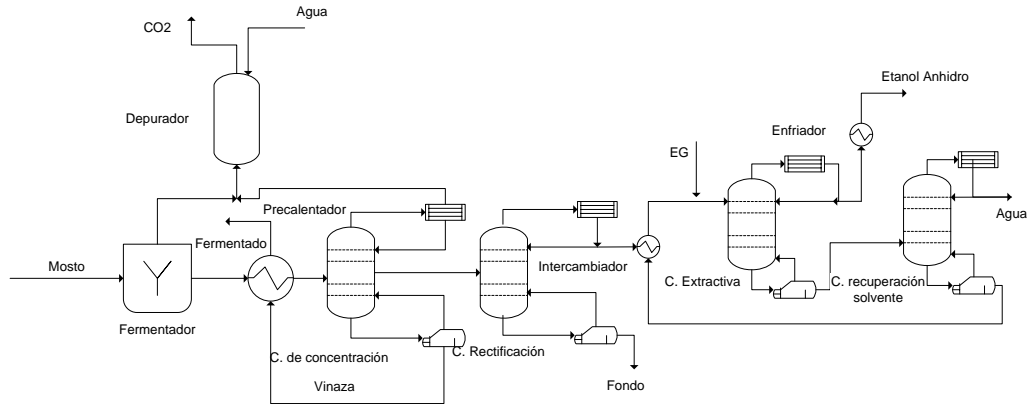
Así mismo, la utilización del benceno como agente de arrastre no es recomendable debido a sus propiedades cancerígenas (Kiss and Suszwalak 2012).

### **3.3 Destilación Extractiva**

En este tipo de destilación, Figura 3.3, una tercer sustancia llamada agente extractivo o solvente es añadido al sistema de etanol agua. El agente extractivo modifica la volatilidad relativa de los componentes de la mezcla sin formar nuevos azeótropos y permitiendo de esta manera la separación.

El solvente añadido debe tener una menor volatilidad con respecto a su separación en la segunda columna de destilación. Donde ser recuperado sería mucho más sencillo. Además, el solvente debe tener un mayor punto de ebullición. Ha sido sugerido que a mayor viscosidad relativa de los solventes empleados en la destilación extractiva podría disminuir la eficiencia de la transferencia de masa del proceso. El etilenglicol ha sido tradicionalmente usado para estos propósitos, pero los costos energéticos son mayores que en el caso de la destilación azeotrópica utilizando el benceno.





**Figura 3.3. Diagrama de producción de etanol y deshidratación con destilación extractiva utilizando etilenglicol como solvente.**

El solvente es alimentado en la bandeja localizada sobre la corriente de alimentación de etanol que viene de la columna de rectificación. A diferencia de la destilación azeotrópica, el etanol anhidro es removido del fondo. Esta corriente es enviada a la columna para recuperar el solvente donde el etilenglicol es recolectado en el fondo gracias a su baja volatilidad. Este es recirculado a la columna extractiva. El contenido de agua en la mezcla inicial es recuperado en el destilado de la columna de recuperación donde el etilenglicol es recirculado, la reducción de temperatura en la corriente a 80 °C es requerida para la alimentar la columna extractiva (Kiss and Suszwalak 2012).

### **3.4 Destilación Extractiva Salina**

El uso de agentes extractivos salinos en los procesos de destilación extractiva ha sido estudiado hace pocos años. El acetato de potasio es el más utilizado. Como las sales son componentes no volátiles, el destilado obtenido en las columnas de destilación es mucho más sencillo de separar, así mismo los costos de energía son menores comparados con la destilación extractiva tradicional. El efecto de la sal consiste en la solvatación preferencial de los iones formados por la disociación de la sal con el componente menos volátil que permite un incremento en la volatilidad relativa del componente más volátil, etanol.

Dos posibles configuraciones han sido simuladas para la deshidratación de etanol usando acetato de potasio. En el primer caso, el punto inicial es una solución de etanol diluida que es alimentada a la columna de destilación extractiva salina seguida por una evaporación multietapas y un secado por aspersion para recuperar la sal. El segundo caso tiene una columna de destilación previa para concentrar la solución de etanol la cual es alimentada a la columna de destilación extractiva salina con la posterior recuperación de sal a través del secado por aspersion.

Esta segunda presenta mejor resultados desde el punto de vista de costo energético. La sal utilizada no es tóxica, la cual indica que este proceso puede reemplazar la destilación azeotrópica tradicional que utiliza acarreadores tóxicos tales como el benceno. Además, se emplea el  $\text{CaCl}_2$ , sales inorgánicas, polímeros como poliesteramidas y poli estírenos

### **3.5 Adsorción**

La adsorción es otra operación unitaria, Figura 3.4, empleada en la industria para la deshidratación de etanol. En esta operación, la mezcla etanol agua pasa a través de un aparato usualmente cilíndrico que contiene una cama con un material adsorbente.

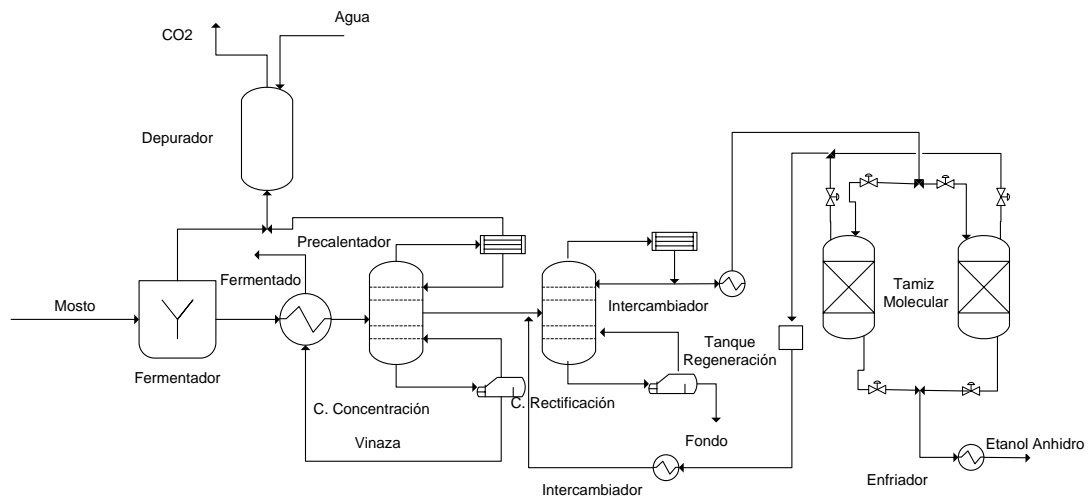
Debido a la diferencia en la afinidad de moléculas de agua y etanol con respecto del adsorbente, el agua permanece atrapada en la cama mientras el alcohol etílico pasa la misma cama incrementando su concentración en la corriente que va dejando el equipo.

La utilización de diferentes biomateriales como absorbentes para la deshidratación del etanol, tales como maíz, xilano, celulosa, almidón de maíz, harina de maíz y bagazo de caña han sido propuestos. Los materiales cuya estructura está basada en polisacáridos han demostrado su habilidad para separar agua y etanol.

Una vez que la cama de adsorbente se sature con la sustancia a ser separada, la desorción de esta sustancia debería ser acoplada para hacer posible la reutilización del material adsorbente. Para la regeneración de los tamices, el gas caliente es requerido.

Aunque rápidamente los deteriora especialmente si la cama es alimentada con una corriente de líquido durante el previo ciclo de adsorción de agua.

Considerando este deterioro, fue desarrollada la tecnología de adsorción con cambio de presión. Ésta tecnología involucra el uso de dos camas de adsorción. Mientras una cama produce vapores de alcohol anhidro sobrecalentado bajo presión, la otra es regenerada bajo condiciones de vacío por recirculación de pequeñas porciones de vapores de etanol sobrecalentados a través de tamices saturados. El sistema de alimentación lleva usando vapores sobre calentados desde la columna de rectificación. En esta manera, la vida de los tamices moleculares puede ser prolongada por varios años. Son costos bajos el reemplazar el material adsorbente así que reduce los costos de operación (Delgado et al. 2013).



**Figura 3.4. Diagrama de producción de etanol y deshidratación por medio de adsorción.**

### **3.6 Pervaporación.**

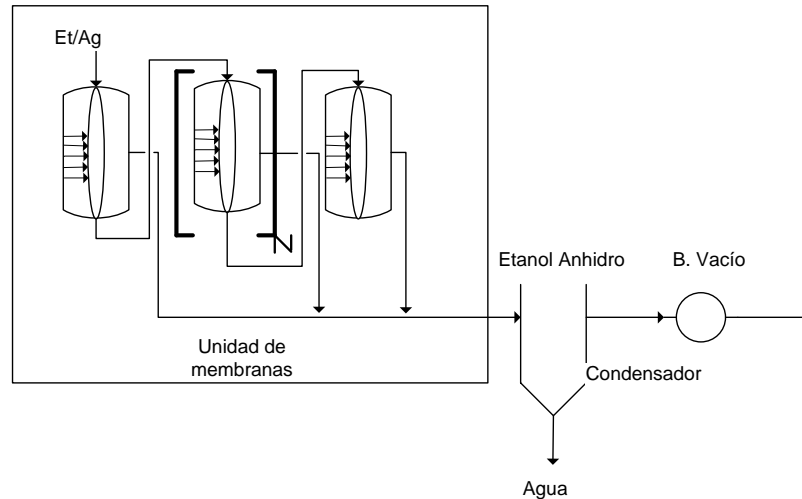
Es una operación, Figura 3.5, basada en la separación de dos componentes por una membrana selectiva bajo un gradiente de presión en el cual el componente pasa a través de la membrana y es removido como una corriente gaseosa permeable, mientras

retiene el otro componente en fase líquida y es removido como una corriente concentrada.

Membranas de poli vinil alcohol. Estas membranas presentan una alta selectividad favoreciendo el pase del agua a través de ellas y una gran retención de varios solventes orgánicos. Solo las membranas de poli vinil alcohol permiten el cambio de equilibrio de fase de las soluciones etanol agua de tal manera que la transferencia de masa entre las fases líquido y vapor es determinada por la membrana semipermeable y no por la interface libre.

La fuerza impulsora de pervaporación es mantenida gracias a la aplicación de vacío en el lado permeable de la membrana. La diferencia parcial de presiones puede ser incrementada elevando la temperatura de alimentación lo más alto posible. Lo permeable es después condensado y genera una corriente líquida que puede ser recirculada a una columna de rectificación. Han sido propuestas diferentes modificaciones químicas para las membranas de poli vinil alcohol para mejorar las fases hidrofílicas e hidrofóbicas para mejorar la selectividad y el flujo de estas membranas (Kaewkannetra et al. 2011; Kalyani et al. 2008).

La pervaporación ofrece una serie de ventajas comparadas con la destilación azeotrópica o la extractiva por que el producto no contiene trazas de acarreadores ni solventes.



**Figura 3.5. Diagrama de deshidratación de etanol por Pervaporación.**

Además, esta tecnología es fácilmente ajustable y muy flexible con respecto a los cambios de la concentración de alimentación. El inicio y fin del proceso requiere un mínimo trabajo y supervisión. Finalmente, las unidades de Pervaporación son compactas y no necesitan grandes áreas comparadas con las torres azeotrópicas de destilación.

Esta operación consume menos energía que las operaciones convencionales basadas en la destilación. El uso de Pervaporación ha llegado a ser muy prometedor considerando el desarrollo de membranas, las cuales han permitido aumentar la selectividad y el flujo permeable (Kaewkannetra et al. 2011; Kalyani et al. 2008).

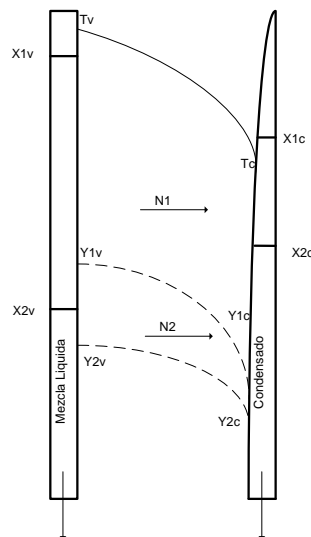
### **3.7 Destilación difusiva**

La destilación difusiva, Figura 3.6, es un proceso de vaporización/condensación en presencia de un gas inerte estancado. En este proceso ambas diferencias de volatilidades en los componentes a ser separados y la diferencia en su difusión a través de un gas inerte estancado son explotadas para lograr la separación.

En este proceso a una mezcla líquida le es permitido fluir como una película líquida sobre la superficie vaporizante y es vaporizada a una temperatura sobre su

punto de burbuja. La mezcla de vapor producida por el vaporizador se difunde a través de una capa llena con un gas inerte el cual trabaja como un filtro selectivo que permite diferencias en tasas relativas de difusión. La mezcla de vapor difundida llega a la superficie de condensación donde es condensada a menor temperatura. Dependiendo del flujo molar de los componentes, un condensado de composición diferente a la composición de la mezcla original es formado y fluye como una película líquida sobre la superficie de condensación (Singh and Prasad 2011).

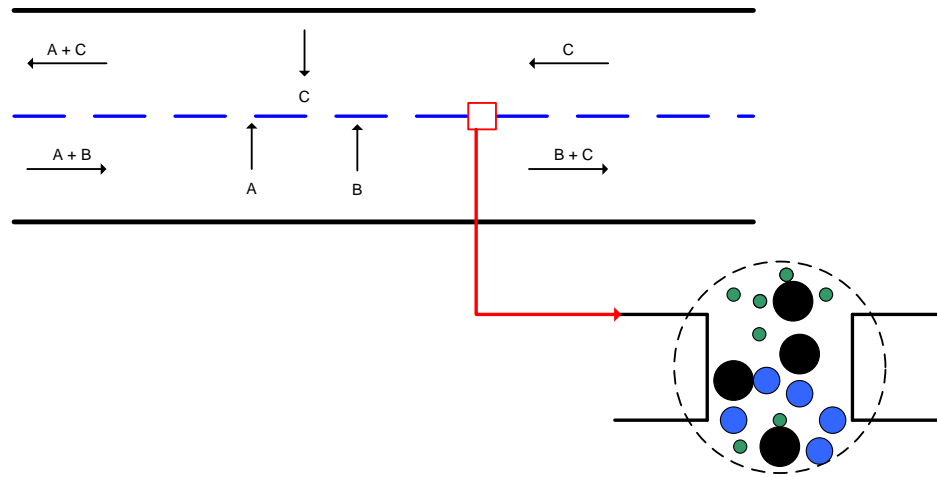
La destilación difusiva es un proceso novedoso en comparación con otros procesos de deshidratación de etanol disponibles, como en este proceso de separación está gobernado no solo por el equilibrio vapor/líquido sino también por la diferencia en tasas relativas de difusión de componentes a través de un gas inerte. En un proceso de destilación por difusión no hay necesidad de auxiliares y además no hay cambios de presión en el sistema (Singh and Prasad 2011).



**Figura 3.6. Principio de la destilación difusiva**

### **3.8 Difusión de fricción**

El mecanismo de trabajo en el nivel molecular es representado por la Figura 3.7.



**Figura 3.7. Principio de la separación difusión de fricción.**

Cuando se considera la difusión de las moléculas A y B a través de una especie C, la molécula más pequeña A experimenta en términos de difusión, menos obstáculo por parte del llamado gas de arrastre C que la molécula más grande B. Esto resulta en una mayor velocidad de difusión de A comparada con B, la cual puede ser explotada hasta lograr la separación de los dos gases.

El equipo consiste en dos túneles que están separados por una membrana porosa. La mezcla de alimentación A+B ingresa por un lado del dispositivo; el gas de arrastre C entra por el otro lado. En este arreglo, es elegido un flujo a contra corriente pero el concepto también funciona para flujo en paralelo (Breure, Peters, and Kerkhof 2008).

A se difunde contra C más fácil que lo que lo hace B. Así mismo, el efecto neto es un enriquecimiento del componente A en una de las corrientes de salida y una reducción de concentración del componente A en la otra corriente de salida. El componente C termina en ambas corrientes de salida y así mismo A y B tienen que ser recuperadas de esas corrientes de salida.

El gradiente de presión necesitado para el flujo convectivo a través de los canales puede ser despreciable. La difusión de fricción funciona de manera isotérmica e isobárica en ambos lados de la barrera porosa. La separación está basada solo en los procesos de difusión (Breure, Peters, and Kerkhof 2008).

Cuando describimos a la difusión de fricción, el proceso puede ser dividido en tres partes:

1. Transporte a lo largo del lado de la alimentación.
2. Transporte a través de la membrana porosa.
3. Transporte a lo largo del lado de arrastre.

### **3.9 Destilación reactiva**

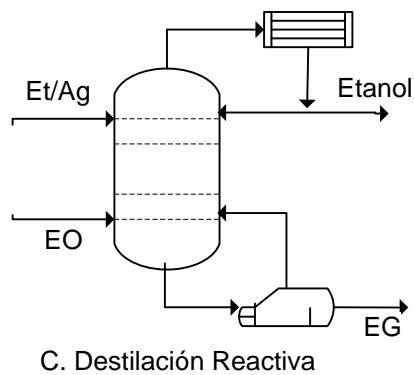
La destilación reactiva, combina la reacción y la destilación en una sola columna, donde los reactantes son transformados a productos con una separación de productos simultánea y la separación permite cruzar las concentraciones azeotrópicas y las fronteras de destilación; por lo tanto, facilita la purificación del producto, (véase Figura 3.8).

El rendimiento de equilibrio se puede aumentar significativamente mucho más allá de las limitaciones de equilibrio por la constante remoción de productos de la mezcla reactante.

Este proceso además tiene algunas ventajas importantes tales como la reducción en energía, consumo de solvente, número de unidades de equipo y evita puntos calientes por la evaporación simultánea del líquido. Estas ventajas permiten la reducción en costos de capital y operación (Tavan and Hosseini 2013).

La aplicación de la destilación reactiva está limitada a sistemas en los que la velocidad de reacción es elevada y no hay desajuste de temperaturas favorables para la reacción y separación.





**Figura 3.8. Esquema de una destilación reactiva.**

### **3.10 Evaluación de procesos de deshidratación de etanol**

Hay desventajas en el uso de estos métodos por mencionar algunos tenemos:

- **Destilación por cambio de presión:** Industrialmente no es recomendable por los altos costos de operación debido a las bajas presiones que requiere mantener.
- **Destilación azeotrópica, Destilación extractiva y Destilación extractiva salina:** Al utilizar agentes químicos externos, para la formación de azeótropos ternarios y modificar la volatilidad de la mezcla, la pureza de los compuestos se ve afectada por la contaminación de los mismos agentes.
- **Adsorción:** Se genera un costo adicional por los procesos de desorción y reemplazo del material adsorbente.
- **Pervaporación:** Existe un elevado costo en la adquisición de las membranas.
- **Destilación difusiva:** Las columnas de destilación por difusión no pueden manejar grandes tasas de flujo de alimentación, debido a la pequeña pared anular de gas. En una tasa de flujo grande las dos películas se tocarían y esto afecta la selectividad y el proceso. Para una gran escala de producción se puede utilizar un

proceso híbrido donde se combina la destilación por difusión y una destilación convencional.

- ***Difusión de fricción:*** Continua en fase de experimentación.
  
- ***Destilación Reactiva:***
  - Condiciones de proceso incompatibles. En algunos procesos las condiciones óptimas de temperatura y presión para destilación puede estar lejos de ser óptimo para la reacción y viceversa.
  - Escalar a grandes flujos. Es difícil diseñar procesos de destilación reactiva para grandes tasas de flujo por los problemas de distribución de líquido en columnas empacadas de destilación reactiva
  - Requisito de tiempo de residencia. Si el tiempo de residencia para la reacción es largo, entonces un tamaño grande y gran columna se necesitarán bandejas de retención.
  - Limitaciones de volatilidad. Los reactivos y productos deben tener la volatilidad adecuado para mantener altas concentraciones de los reaccionantes y bajas concentraciones de productos de la zona de reacción.

## CAPÍTULO 4. METODOLOGÍA

Para llevar a cabo el presente proyecto, se realizaron las siguientes tres etapas:

- A. Análisis de sistemas reactivos.
- B. Diseño y simulación.
- C. Evaluación.

A continuación, se describe cada una de las mencionadas etapas y las fases que contemplan:

### **4.1 Análisis de sistemas reactivos.**

Se realiza una investigación sobre un conjunto de reacciones acuosas factibles para el proceso.

*Selección de sistemas reactivos acuosos.*

En la búsqueda, se adquirieron:

- Reacciones secundarias.
- Datos cinéticos experimentales los cuales nos permiten realizar las etapas posteriores.
- Entalpías de reacción.
- Precio de reactivos y productos.

Basados en los productos de las reacciones, se realizó un análisis en Aspen Plus para la búsqueda de azeótropos con las especies implicadas. Esto con la finalidad de encontrar complicaciones en los sistemas de separación.

## **4.2 Diseño y simulación**

En esta etapa se realizan dos procesos distintos para cada reacción. Uno de ellos consiste en un sistema de reacción y separación. El otro es una versión intensificada la cual se fundamenta en una destilación reactiva.

Cada proceso es diseñado y simulado a distintas concentraciones de la mezcla etanol/agua, las cuales son:

- Cerca del punto azeotrópico 20 % mol agua – 80 % mol etanol.
- Concentración diluida 90 % mol agua – 10 % mol etanol.
- Concentración a la salida del fermentador 96 % mol agua – 4 % mol etanol.

La concentración cerca del punto azeotrópico se trabaja con la finalidad de explorar solo la fase de deshidratación. Para ello se supone que existe la columna de concentración y la de rectificación en el proceso global.

La concentración diluida se trabaja suponiendo que se realiza solo la separación de la vinaza en una columna de concentración menor a la típica de 69 platos.

La concentración a la salida del fermentador se trabaja para el caso ideal donde no existe vinaza, solo existe un efluente del fermentador de la mezcla etanol/agua.

Para todos los casos de estudio, se utiliza un flujo molar de entrada de 100 kmol/h a una temperatura de 30 °C la cual es el promedio a la salida del fermentador. Los flujos de entrada son a presión de operación del reactor. En el caso de óxido de etileno y óxido de propileno entran en fase líquida a 20 °C.

En la entrada del reactor PFR, los reactivos se encuentran como vapor saturado.

Los procesos desarrollados se llevan a cabo con el modelo termodinámico UNIQUAC para la fase líquida y Redlich-Kwong para la fase vapor.

El diseño y la simulación se llevaron a cabo en el software Aspen Plus.

En el diseño y simulación de procesos se introduce la siguiente codificación que se divide en 4 secciones:

La primera sección contiene dos o tres letras que representan el tipo de proceso:

- RSE: Configuración para el sistema reactor – separación.
- RD: Configuración de intensificación de procesos basada en destilación reactiva.
- RR: Reactor PFR.

La segunda sección contiene dos letras que representan el tipo de reactivo a utilizar:

- EO: Óxido de etileno.
- PO: Óxido de propileno.
- EE: Etileno.

La tercera sección contiene dos números que representan el porcentaje mol de agua en la mezcla a tratar:

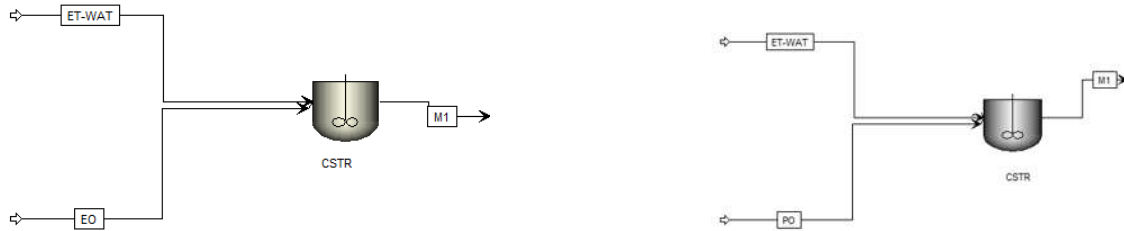
- 20: 20 % mol de agua.
- 90: 90 % mol de agua.
- 96: 96 % mol de agua.

La cuarta sección contiene dos números que representan el porcentaje mol de etanol en la mezcla a tratar:

- 80: 80 % mol de etanol.
- 10: 10 % mol de etanol.
- 4: 4 % mol de etanol.

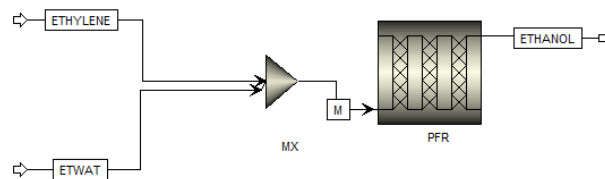
*Diseño y simulación de la fase reactiva del proceso.*

Para el diseño de la fase reactiva, en los procesos de óxido de etileno y óxido de propileno, se elige un reactor cinético CSTR para una producción continua (véase Figura 4.1).



**Figura 4.1. Sistemas reactivos para óxido de etileno y óxido de propileno.**

Para el proceso de hidratación de etileno se utiliza un reactor cinético de flujo pistón, (véase Figura 4.2).



**Figura 4.2. Sistema reactivo para hidratación de etileno.**

Una vez definidos los equipos en los procesos a simular, se introducen los valores de las variables cinéticas del modelo de reacción. Dicho modelo corresponde a la ley de potencia para el óxido de etileno y para el óxido de propileno. En el caso del etileno, corresponde a una cinética Langmuir-Hinshelwood Hougen-Watson (LHHW).

Después, se le otorga un valor estándar a cada variable importante del proceso, (véase Tabla 4.1). Se realiza un análisis paramétrico de cada una, utilizando la herramienta de sensibilidad de aspen plus. Los límites superior e inferior se muestran en la Tabla 4.2. Los objetivos de esta etapa de barrido son:

- Encontrar los valores de las variables que arrojen la menor concentración de agua y de reactivo (óxido de etileno, óxido de propileno y etileno) a la salida del reactor.
- Influencia de las variables de proceso.
- Tendencia de cada variable de proceso.

**Tabla 4.1. Valor estándar de las variables en la fase reactiva.**

Variable	Valor estándar
Tiempo de residencia	0.5 h
Temperatura del reactor	150 °C
Presión del reactor	1 Atm
Flujo de alimentación del reactivo.	30 kmol/h

**Tabla 4.2. Límite superior e inferior. Análisis paramétrico de la fase reactiva.**

Variable	Límite inferior	Límite superior
Tiempo de residencia	0.05 h	2 h
Temperatura del reactor	100 °C	300 °C
Presión del reactor	1 Atm	8 atm
Flujo de alimentación del reactivo.	30 kmol/h	200 kmol/h

Una vez que se adquieren los resultados del análisis de sensibilidad, se localizan los valores de los parámetros que se encuentran cerca del objetivo y se inicia un segundo barrido.

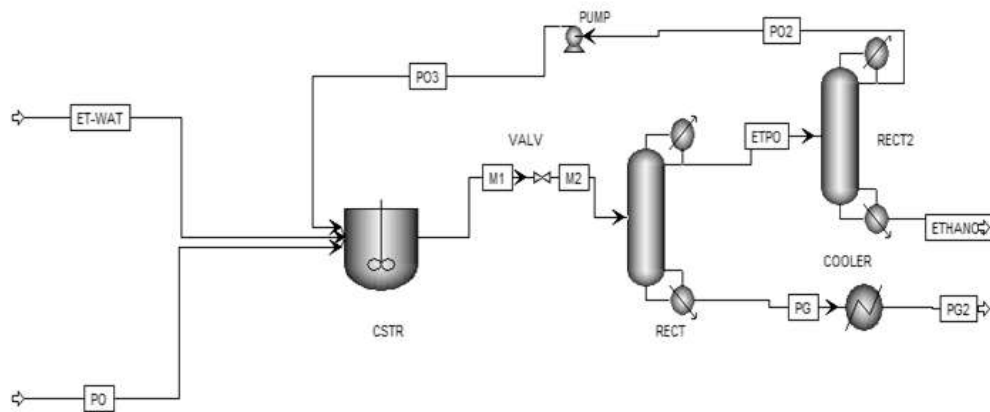
El segundo barrido se realiza sustituyendo los valores estándar iniciales por los valores aproximados al objetivo del análisis y se acotan los límites superior e inferior para un barrido detallado. Al obtenerse el segundo análisis, queda definido el valor final de cada variable.

Debido a la entalpía de reacción de la hidratación del óxido de etileno y del óxido de propileno tenemos una generación de calor en el reactor, el cual podemos

aprovechar. Para ello, se añade un servicio de enfriamiento el cual consiste en la generación de vapor de baja, media y alta presión dependiendo el caso.

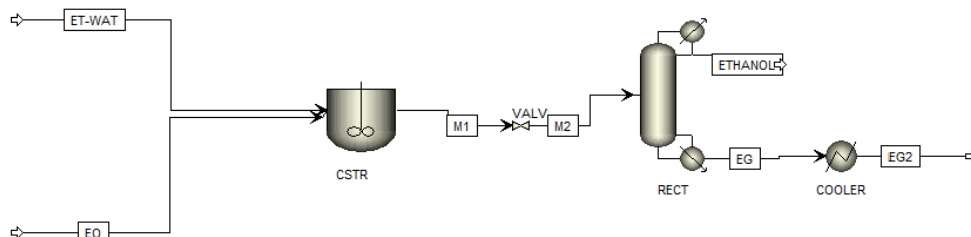
*Diseño y simulación de la fase de separación del proceso.*

En la fase de separación, en los procesos de óxido de propileno y óxido de etileno, Figura 4.3 y Figura 4.4, obtenemos a la salida del reactor una mezcla de glicoles y etanol. Debido a la marcada diferencia en los puntos de ebullición de cada componente se elige una destilación para su separación.



**Figura 4.3** Proceso de separación para óxido de propileno.

Una vez definidos los equipos en los procesos a simular, se selecciona el método riguroso de Aspen Plus para su solución, rad frac.



**Figura 4.4.** Proceso de separación para óxido de etileno.



Después, se le otorga un valor estándar a cada variable de proceso importante, Tabla 4.3, y se realiza un análisis paramétrico de cada una, utilizando la herramienta de sensibilidad de aspen plus. Los límites superior e inferior se muestran en la Tabla 4.4. Los objetivos de esta etapa de barrido son:

- Encontrar los valores de las variables de mayor concentración de etanol en el flujo de destilado.
- Encontrar los valores de las variables de mayor flujo de etanol en el flujo de destilado para una buena recuperación.
- Influencia de las variables de proceso.
- Tendencia de cada variable de proceso.

Los procesos de separación se llevan a cabo a presión atmosférica. Dada esta circunstancia, se coloca una válvula entre el reactor y la torre de destilación para obtener la presión de operación de la columna.

**Tabla 4.3. Valores estándar para variables de la fase de separación.**

Variable	Valor estándar
Etapa de alimentación	3
Relación de reflujo (RR)	1
Flujo de destilado	4 kmol/h
Número de etapas (Incluye condensador y ebullidor).	10

**Tabla 4.4. Límite superior e inferior. Análisis paramétrico de la fase de separación.**

Variable	Límite inferior	Límite Superior
Etapa de alimentación	2	Etapa del ebullidor
Relación de reflujo (RR)	0.1	90
Flujo de destilado	3 kmol/h	85 kmol/h

Una vez que se determinan los resultados del análisis de sensibilidad, se localizan los valores de los parámetros que se encuentran cerca del objetivo y se inicia un segundo barrido.

El segundo barrido se realiza sustituyendo los valores estándar iniciales por los valores aproximados al objetivo del análisis y se acotan los límites superior e inferior para un barrido detallado.

Para la variable de número de etapas, si no se alcanzan los objetivos de pureza y recuperación, se aumenta una etapa y se reinicia el análisis paramétrico. En cambio, si se logran los propósitos se disminuye una etapa y se vuelve a comenzar con el barrido. La finalidad es lograr la menor cantidad de etapas que se reflejará en los costos de capital. Al obtenerse el análisis con límites acotados, queda definido el valor final de cada variable en el caso del proceso.

En el caso del óxido de propileno, tenemos una segunda torre de destilación. La necesidad de la reacción en tener un exceso de reactivo, provoca que el flujo de destilado de la primera torre sea una mezcla de óxido de propileno y etanol. Dicha mezcla debe separarse. Por lo tanto, se adiciona otra columna para su separación. Por la diferencia entre puntos de ebullición de los componentes de la columna, tenemos que el etanol anhidro se obtiene en el fondo de la segunda columna y en el domo recuperamos el óxido de propileno.

El óxido de propileno recuperado se recircula al proceso. Del domo sale en fase líquida a presión atmosférica y se emplea una bomba para elevar la presión del fluido a la de operación del reactor.

Para definir el número de etapas en la segunda torre de destilación en el caso del óxido de propileno se utiliza el modelo de métodos cortos de Aspen plus, torre DSTWU.

Una vez definido el número de etapas, se cambia la torre DSTWU por una torre de métodos rigurosos, Rad Frac. Después, se realiza la misma metodología utilizada para la primera columna. Las variables estándar a utilizar se muestran en la Tabla 4.5. Los límites para el análisis paramétrico se muestran en la Tabla 4.6.

**Tabla 4.5. Variables de la fase de separación. Segunda torre**

Variable	Valor estándar
Etapas de alimentación	3
Relación de reflujo (RR)	1
Flujo de destilado	10 kmol/h
Número de etapas (Incluye condensador y ebullición)	16

**Tabla 4.6. Límite superior e inferior segunda torre. Análisis paramétrico de la fase de separación.**

Variable	Límite inferior	Límite Superior
Etapas de alimentación	2	Etapas de ebullición
Relación de reflujo (RR)	0.1	10
Flujo de destilado	7 kmol/h	15 kmol/h

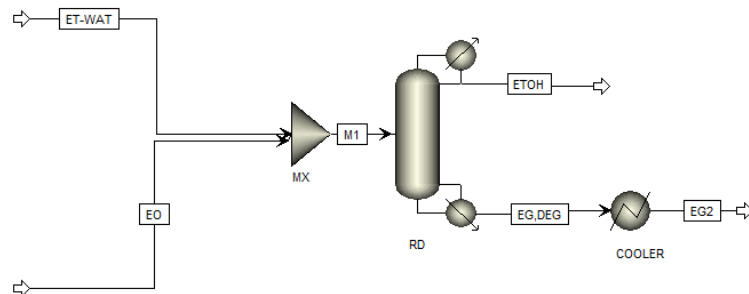
Se indica el tipo de servicio que requiere tanto el ebullición y condensador de acuerdo al rango de temperatura necesario para el proceso. Además, de la electricidad que la bomba solicita.

El calor de la corriente de glicoles, en el fondo de la torre, puede ser aprovechado. Por ende, se coloca un enfriador el cual tiene como servicio la generación de vapor de baja presión.

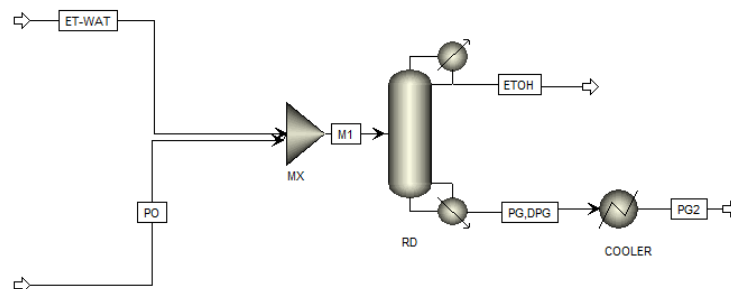
*Intensificación de procesos (diseño y simulación de destilación reactiva)*

La intensificación de proceso se lleva a cabo a través de una destilación reactiva por medio del método riguroso, el cual es representado por la torre Rad Frac, (véase Figuras 4.5 y 4.6).

Una vez definido el equipo para la intensificación, se introducen los valores de las variables cinéticas del modelo de reacción. Dicho modelo corresponde a la ley de potencia para el óxido de etileno y para el óxido de propileno.



**Figura 4.5. Destilación reactiva óxido de etileno.**



**Figura 4.6. Destilación reactiva óxido de propileno.**

Después se le otorga un valor estándar a cada variable de proceso importante, Tabla 4.7. Se realiza un análisis paramétrico de cada una utilizando la herramienta de

sensibilidad de aspen plus. Los límites superior e inferior se muestran en la Tabla 4.8. Los objetivos de esta etapa de barrido son:

- Encontrar los valores de las variables que arrojen la menor concentración de agua y de reactivo (óxido de etileno, óxido de propileno y etileno) a la salida del domo de la torre.
- Encontrar los valores de las variables de mayor flujo de etanol en el flujo de destilado para una buena recuperación.
- Influencia de las variables de proceso.
- Tendencia de cada variable de proceso.

**Tabla 4.7. Variables estándar de la destilación reactiva.**

Variable	Valor estándar
Etapa de alimentación	2
Relación de reflujo (RR)	1
Flujo de destilado	4 kmol/h
Número de etapas (Incluye condensador y ebullición)	5
Hold up (m <sup>3</sup> )	1
Presión (atm)	1
Flujo de alimentación del reactivo.	30 kmol/h
Etapas reactivas	4

**Tabla 4.8. Límite superior e inferior de la destilación reactiva**

Variable	Límite inferior	Límite Superior
Etapa de alimentación	2	Etapa de ebullición
Relación de reflujo (RR)	0.1	10
Flujo de destilado	3 kmol/h	85 kmol/h
Hold up (m <sup>3</sup> )	0.1	2
Presión (atm)	1	8
Flujo de alimentación del reactivo.	30 kmol/h	200 kmol/h

Una vez que se adquieren los resultados del análisis de sensibilidad, se localizan los valores de los parámetros que se encuentran cerca del objetivo y se inicia un segundo barrido.

El segundo barrido se realiza sustituyendo los valores estándar iniciales por los valores aproximados al objetivo del análisis y se acotan los límites superior e inferior para un barrido detallado.

Al obtenerse el segundo análisis, queda definido el valor final de cada variable.

Se indica el tipo de servicio que requiere tanto el ebullición, como el condensador de acuerdo al rango de temperatura necesario para el proceso.

El calor de la corriente de glicoles, en el fondo de la torre, puede ser aprovechado. Por ende, se coloca un enfriador el cual tiene como servicio la generación de vapor de baja presión.

### **4.3 Comparación y evaluación.**

Para poder realizar una evaluación de los sistemas reactivos propuestos, se realiza un análisis económico de cada proceso.

#### *Evaluación de los sistemas reactivos propuestos.*

Se introduce, en Aspen Plus, el precio de cada corriente alimentación y producto los cuales se muestran en la Tabla 4.9 (Made-in-China.com, 2016).

**Tabla 4.9. Precios de reactivos y productos**

<b>Material</b>	<b>Costo</b>
Óxido de etileno	\$ 1 300.00 USD/Ton
Óxido de propileno	\$ 1 200.00 USD/Ton
Etanol anhidro	\$ 0.44 USD/l
Etilenglicol	\$ 1 200.00 USD/Ton
Propilenglicol	\$ 1 275.00 USD/Ton
Etanol 4 % mol	\$ 0.02 USD/l
Etanol 10 % mol	\$ 0.04 USD/l
Etanol 80 % mol	\$ 0.35 USD/l

Para fijar el precio del etanol diluido a sus distintas concentraciones se calcula el porcentaje equivalente a la dilución con base al precio del etanol anhidro.

Una vez designados los precios de las corrientes de proceso y los servicios, de la base de datos de Aspen Plus, necesarios para cada etapa. Se procede a dimensionar los equipos dentro del simulador y se da inicio a una autoevaluación de Aspen Economic Analyzer para obtener el costo del proyecto.

Los resultados que nos arroja la autoevaluación de Aspen Economic Analyzer son:

- Costo de capital.
- Costo de operación. En esta parte se toma en cuenta el costo de materia prima, mantenimiento preventivo, mano de obra, servicios, depreciación.
- Ventas anuales.

Todos los costos son basados en la base de datos de Aspen Economic Analyzer para una planta creada en Estados Unidos de América.

Con los valores de los costos y ventas, se calcula la ganancia en cada proceso.

Para finalizar, se comparan los procesos en las siguientes categorías.

- Porcentaje de pureza.
- Porcentaje de recuperación de etanol.
- Emisiones de CO<sub>2</sub> por servicios.
- Costo total de servicios.
- Costo capital.
- Costo de operación.
- Venta.
- Ganancia.



## CAPÍTULO 5. RESULTADOS

A lo largo de este capítulo se da a conocer el resultado obtenido por la investigación. En él se muestran los sistemas reactivos a utilizar, el diseño y simulación del proceso de acuerdo a las necesidades de cada proceso; tanto procesos convencionales como los intensificados, una evaluación económica de cada propuesta y la comparación de cada conjunto de operaciones.

### **5.1 Selección de sistemas reactivos.**

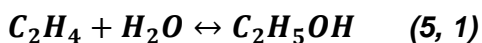
Se tienen distintos sistemas reactivos atractivos para lograr el objetivo del estudio. Entre ellos se encuentra: la hidratación del etileno, hidratación del óxido de etileno e hidratación del óxido de propileno.

Los sistemas mencionados son atractivos debido a que tenemos como resultado etanol anhidro, etilenglicol y propilenglicol como productos alternos. Dichas sustancias tienen valor industrial. A lo largo de la sección 5.1 se lleva a cabo un estudio termodinámico para confirmar la ausencia de azeótropos entre los reactivos y productos que puedan limitar el objetivo del trabajo. Así mismo, se realiza una investigación bibliográfica acerca de posibles reacciones secundarias en el sistema.

#### **5.1.1 Etileno/Etanol**

La mayor parte de etanol producido en Estados Unidos es generado a partir de procesos de fermentación. Sin embargo, una pequeña cantidad es elaborada por vía química, como la hidratación de etileno en fase gaseosa. Este proceso es comercialmente competitivo con un proceso de fermentación cuando el etileno se encuentra disponible (Momose et al. 1982; Roozbehani et al. 2012).

La reacción de nuestro interés es la representada por la Ecuación (5,1).



Esta reacción sigue una cinética LANGMUIR-HINSHELWOOD-HOUGEN WATSON (LHHW), (Véase Ecuaciones (5,2) y (5,3)).

$$r_1 = \frac{k_1 P_w P_E}{(1+k_w P_w+k_E P_E+k_A P_A)^2} \quad (5, 2)$$

$$r_2 = \frac{k_2 P_A}{(1+k_w P_w+k_E P_E+k_A P_A)^2} \quad (5, 3)$$

**Tabla 5.1. Datos cinéticos hidratación de etileno.**

Reacción 1	Reacción 2
$K_1 \left( \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3 \text{cat h atm}^2} \right)$ $= 1.7723 \times 10^{-9} \exp \left( \frac{91130}{RT} \right)$	$K_2 \left( \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3 \text{cat h atm}} \right)$ $= 1.3865 \times 10^{-2} \exp \left( \frac{43915}{RT} \right)$
$K_W (\text{atm}^{-1}) = 1.2328 \times 10^{-17} \exp \left( \frac{162.73}{RT} \right)$	
$K_E (\text{atm}^{-1}) = 2.085 \times 10^{-4} \exp \left( \frac{35.368}{RT} \right)$	
$K_A (\text{atm}^{-1}) = 3.3685 \times 10^{-8} \exp \left( \frac{159.15}{RT} \right)$	

El análisis de la mezcla de reactivos y productos, mostrado en la Figura 5.1, nos presenta la existencia solo del azeótropo etanol/agua a 0.8947 fracción mol de etanol. Este resultado nos indica que es factible la producción de etanol anhidro por medio del sistema reactivo basado en etileno.

**AZEOTROPE SEARCH REPORT**

Physical Property Model: UNIQU-RK    Valid Phase: VAP-LIQ

*Mixture Investigated For Azeotropes At A Pressure Of 101325 N/SQM*

Comp ID	Component Name	Classification	Temperature
ETHYLENE	ETHYLENE	Unstable node	-103.84 C
ETHANOL	ETHANOL	Stable node	78.31 C
WATER	WATER	Stable node	100.02 C

**The Azeotrope**

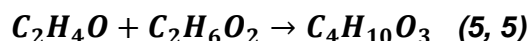
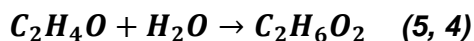
<b>01</b>	Number Of Components: 2		Temperature 78.14 C
	Homogeneous		Classification: Saddle
		MOLE BASIS	MASS BASIS
	ETHANOL	0.8947	0.9560
	WATER	0.1053	0.0440

**Figura 5.1. Análisis de la mezcla de reactivos y productos para la hidratación de etileno.**

### **5.1.2 Óxido de Etileno/Etilenglicol**

El etilenglicol es un líquido transparente, incoloro, ligeramente espeso como el almíbar y leve sabor dulce. Se utiliza como anticongelante en los circuitos de refrigeración de motores de combustión interna, como difusor del calor, para fabricar compuestos de poliéster, y como disolvente en la industria de la pintura y el plástico. El etilenglicol es también un ingrediente en líquidos para revelar fotografías, fluidos para frenos hidráulicos y en tinturas usadas en almohadillas para estampar, bolígrafos, y talleres de imprenta.

La reacción de interés se encuentra representada en las Ecuaciones (5,4) y (5,5). Estas reacciones siguen la cinética de la ley de potencia (véase Ecuaciones (5,6) y (5,7)).



$$r_1 = kT^n e^{(-E/RT)} X_w X_{EO} \quad (5, 6)$$

$$r_2 = kT^n e^{(-E/RT)} X_{EG} X_{EO} \quad (5, 7)$$

**Tabla 5.2. Datos cinéticos óxido de etileno.**

Unidades	Reacción 1	Reacción 2
$k\left(\frac{mol}{m^3 s}\right)$	$3.15 \times 10^{15}$	$6.3 \times 10^{15}$
$E/R\left(\frac{1}{\circ K}\right)$	9547	9547
$\Delta H\left(\frac{J}{mol}\right)$	$-80 \times 10^3$	$-13.1 \times 10^3$

El análisis de la mezcla de reactivos y productos, mostrado en la Figura 5.2 (Ferreira and Trierweiler 2009), nos presenta la existencia solo del azeótropo etanol/agua a 0.8947 fracción mol de etanol. Este resultado nos indica que es factible la producción de etanol anhidro por medio del sistema reactivo basado en óxido de etileno.

#### AZEOTROPE SEARCH REPORT

Physical Property Model: UNIQ-RK    Valid Phase: VAP-LIQ

*Mixture Investigated For Azeotropes At A Pressure Of 101325 N/SQM*

Comp ID	Component Name	Classification	Temperature
WATER	WATER	Saddle	100.02 C
ETHANOL	ETHANOL	Saddle	78.31 C
ETHYL-01	ETHYLENE-GLYCOL	Saddle	197.08 C
DIETH-01	DIETHYLENE-GLYCOL	Stable node	244.94 C
ETHYL-02	ETHYLENE-OXIDE	Unstable node	10.34 C

#### The Azeotrope

<b>01</b>	Number Of Components: 2		Temperature 78.14 C
	Homogeneous		Classification: Saddle
		MOLE BASIS	MASS BASIS
	WATER	0.1053	0.0440
	ETHANOL	0.8947	0.9560

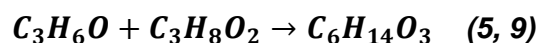
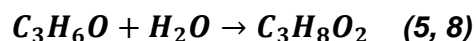
**Figura 5.2. Análisis de la mezcla de reactivos y productos para la reacción con óxido de etileno.**

### 5.1.3 Óxido de Propileno/Propilenglicol

El propilenglicol es utilizado como humectante, solvente y conservador de alimentos. Además, el propilenglicol es utilizado en productos tales como bebidas basadas en cafeína, endulzantes líquidos, helados y refrescos. (Kozlovsky et al. 2002; Shaikhutdinov et al. 2010)

Al igual que el etilenglicol, el propilenglicol funciona como anticongelante para aviones, ya que baja el punto de fusión del agua (Svandov et al. 2005).

La reacción de interés se encuentra representada en las Ecuaciones (5,8) y (5,9). Estas ecuaciones siguen la cinética de la ley de potencia (véase Ecuaciones (5,10) y (5,11)).



$$r_1 = kT^n e^{(-E/RT)} C_w C_{PO} \quad (5, 10)$$

$$r_2 = kT^n e^{(-E/RT)} C_{PG} C_{PO} \quad (5, 11)$$

**Tabla 5.3. Datos cinéticos óxido de propileno.**

Unidades	Reacción 1	Reacción 2
$k \left( \frac{mol}{m^3 s} \right)$	96 000	9 600
$E \left( \frac{J}{mol} \right)$	75 362	82 899
$\Delta H \left( \frac{J}{mol} \right)$	-91 360	-111 000

El análisis de la mezcla de reactivos y productos, mostrado en la Figura 5.3, nos presenta la existencia solo del azeótropo etanol/agua a 0.8947 fracción mol de etanol.

Este resultado nos indica que es factible la producción de etanol anhidro por medio del sistema reactivo basado en óxido de propileno.

### AZEOTROPE SEARCH REPORT

Physical Property Model: UNIQU-RK Valid Phase: VAP-LIQ

*Mixture Investigated For Azeotropes At A Pressure Of 101325 N/SQM*

Comp ID	Component Name	Classification	Temperature
WATER	WATER	Saddle	100.02 C
ETHANOL	ETHANOL	Saddle	78.31 C
PROPA-01	PROPANEDIOL-1,2	Saddle	187.72 C
PROPY-01	PROPYLENE-OXIDE	Unstable node	34.48 C
DIPRO-01	DIPROPYLENE-GLYCOL	Stable node	232.27 C

#### The Azeotrope

01	Number Of Components: 2		Temperature 78.14 C	
	Homogeneous		Classification: Saddle	
			MOLE BASIS	MASS BASIS
	WATER	0.1053	0.0440	
	ETHANOL	0.8947	0.9560	

**Figura 5.3. Análisis de la mezcla de reactivos y productos para la reacción con óxido de etileno.**

## **5.2 Diseño de sistemas reactivos.**

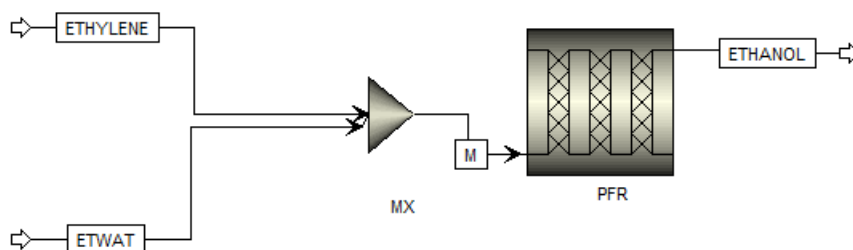
Es importante señalar que en esta sección se describen los análisis sólo para la condición más concentrada de la mezcla etanol/agua ya que para las otras concentraciones es la misma tendencia y fundamento.

### **5.2.1 Diseño y simulación del sistema etileno/etanol.**

La cinética de la reacción de hidratación del etileno ha sido investigada para un catalizador de óxido de tungsteno-zirconio.

A temperatura ambiente, la conversión a etanol por hidratación directa del etileno es apreciable, pero la velocidad de reacción es extremadamente lenta. Un incremento de temperatura desfavorece la proporción de alcohol, mientras que un incremento de presión la favorece debido al menor número de moles en los productos.

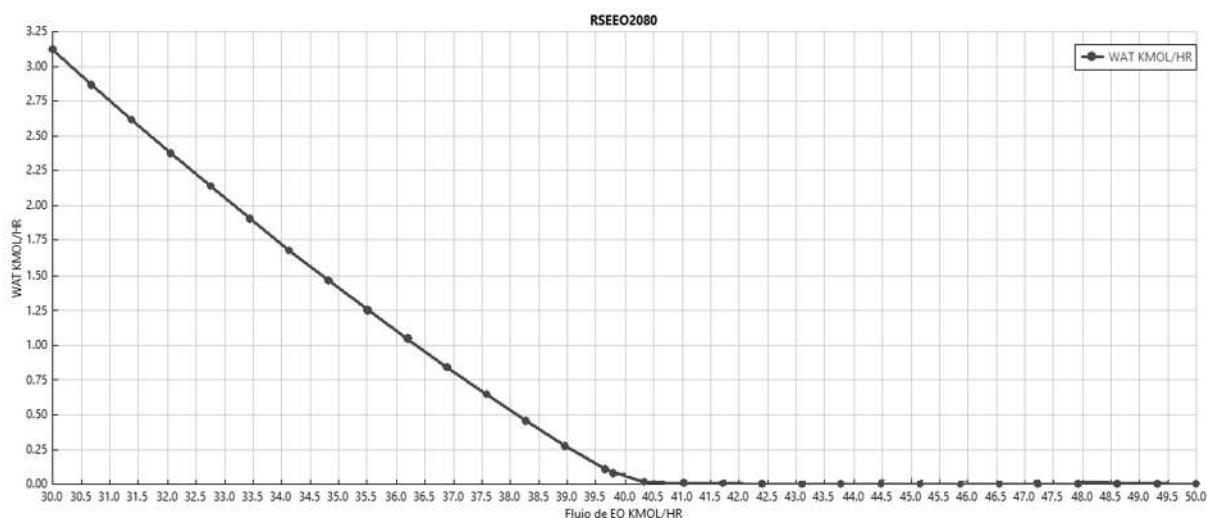
Se realizaron diversas simulaciones, Figura 5.4, para RREE8020, RREE9010 Y RREE964 con distintas configuraciones hasta obtener con un tiempo de residencia de 26 horas. Se realizaron análisis de sensibilidad de parámetros como temperatura, presión, longitud y diámetro del reactor y en ninguna hubo reacción. Esto lo podemos atribuir a que en la cinética tenemos un factor pre exponencial del orden de  $10^{-9}$ . Analizando los parámetros de adsorción de la cinética, podemos observar que en el catalizador se adsorbe más rápido el etanol para su descomposición en etileno y agua que lo que se adsorbe para la producción de etanol.



**Figura 5.4. Diseño del sistema etileno / etanol.**

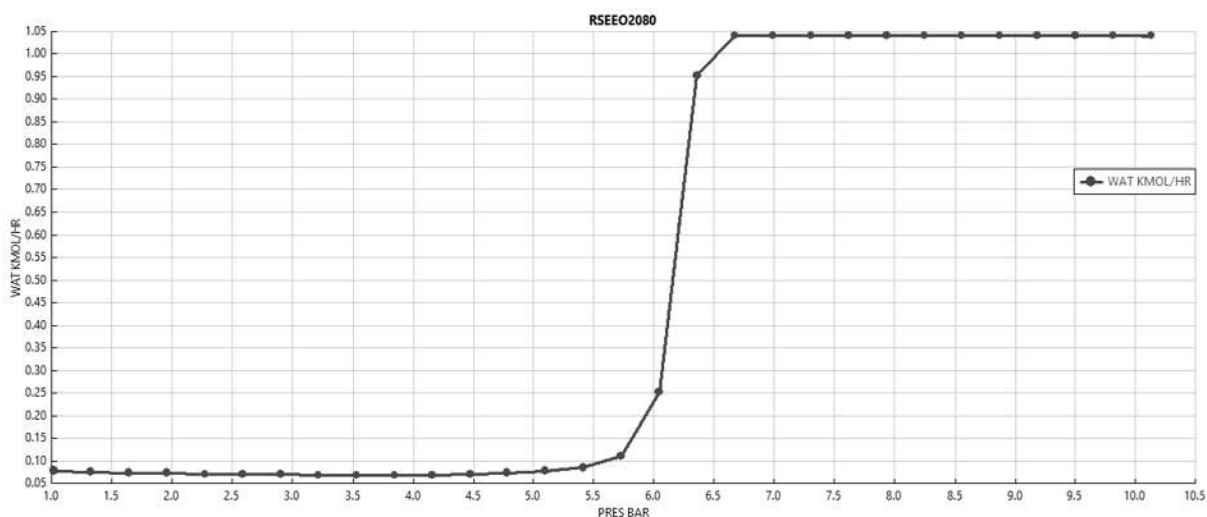
### **5.2.2 Diseño del reactor en el sistema óxido de etileno/etilenglicol.**

De la Figura 5.5 a la 5.16, se muestran los análisis de sensibilidad de los parámetros señalados en la metodología.



**Figura 5.5. Análisis de sensibilidad flujo de entrada óxido de etileno RSEE02080.**

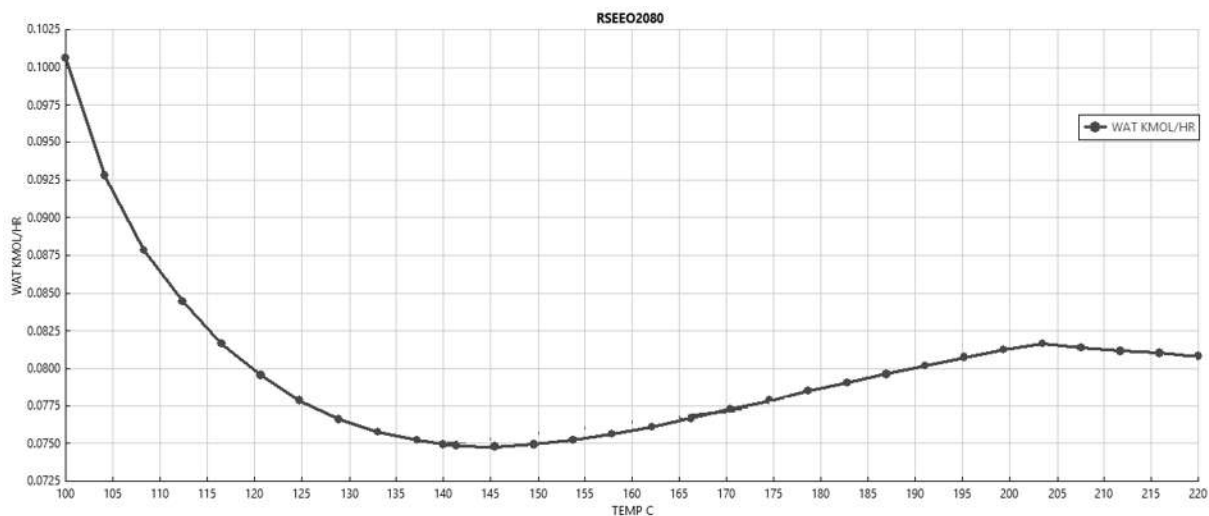
En la Figura 5.5, se observa como disminuye cantidad de agua a la salida del reactor conforme aumenta el flujo de óxido de etileno hasta su agotamiento. Sin embargo, se debe tomar la mínima cantidad posible para eliminar el agua ya que un exceso de óxido de etileno genera una etapa adicional en el proceso de separación para su remoción y promueve una producción extra de dietilenglicol debido a la reacción secundaria. La Figura 5.5 incluye el consumo de óxido de etileno en la transformación del etilenglicol a dietilenglicol. El flujo de entrada para la operación a la concentración problema se encuentra entre 39 – 41 Kmol/h.



**Figura 5.6. Análisis de sensibilidad presión RSEEO2080.**

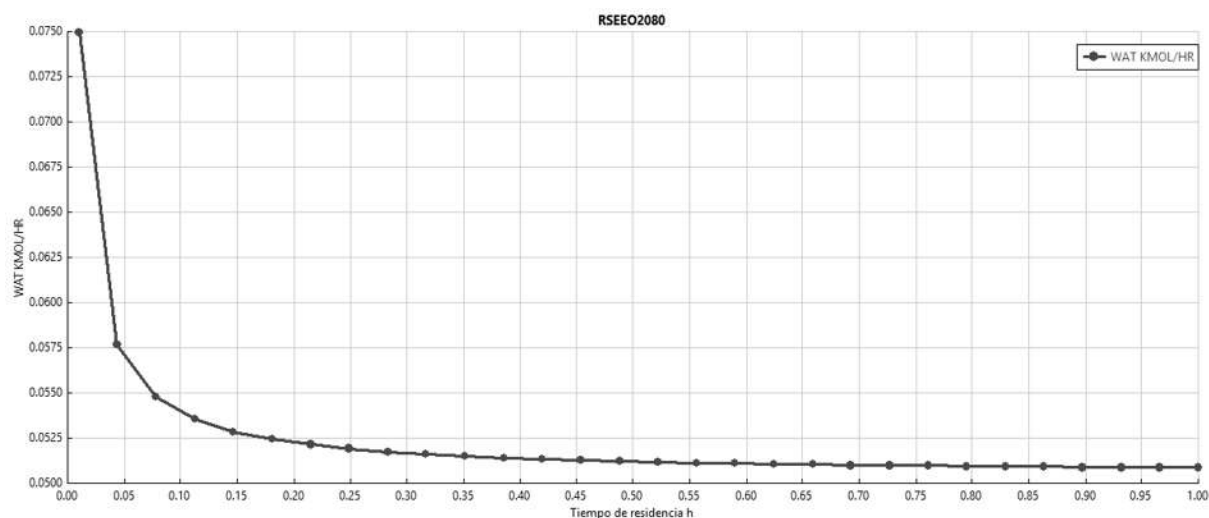
En la Figura 5.6, se observa la influencia de la presión en la cantidad de agua a la salida del reactor. La tendencia la podemos atribuir a que a bajas presiones los reactivos, agua y óxido de etileno, se encuentran en fase vapor lo cual favorece la reacción. A presiones sobre 5 atm., tenemos un aumento de agua a la salida debido a que es más lenta la reacción en fase líquida. Por lo tanto, La presión de operación debe situarse alrededor de 1-2 atm. A esta dilución del etanol.





**Figura 5.7. Análisis de sensibilidad temperatura RSEEO2080**

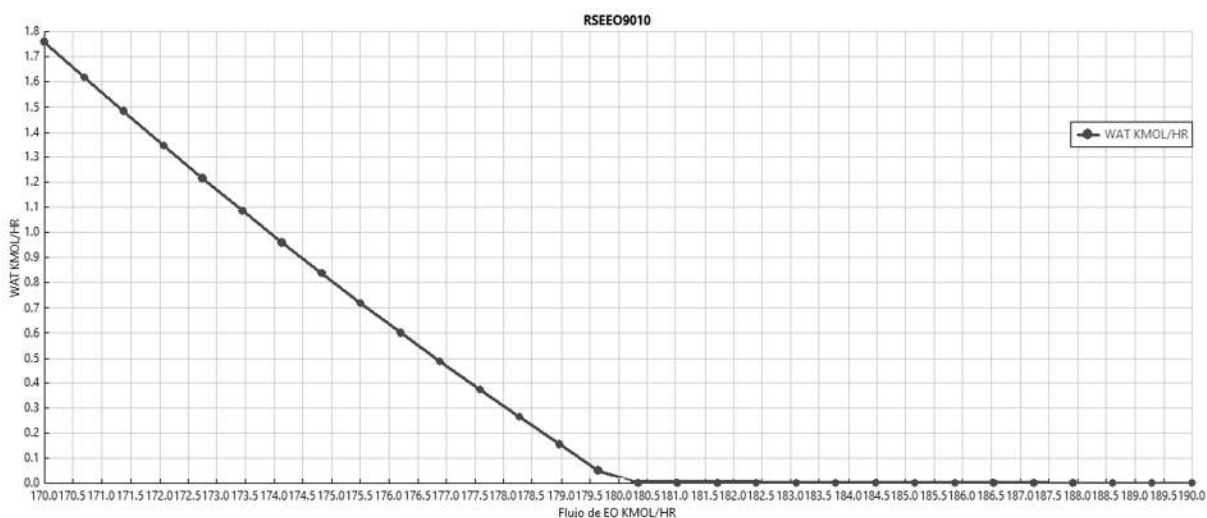
En la Figura 5.7, se observa la influencia de la temperatura en la cantidad de agua a la salida del reactor. Se tiene un punto mínimo entre 140 – 150 °C. Pasando el mínimo se desfavorece la reacción debido al fomento de la reacción secundaria a esta dilución de etanol. La temperatura de operación se encuentra alrededor del punto mínimo.



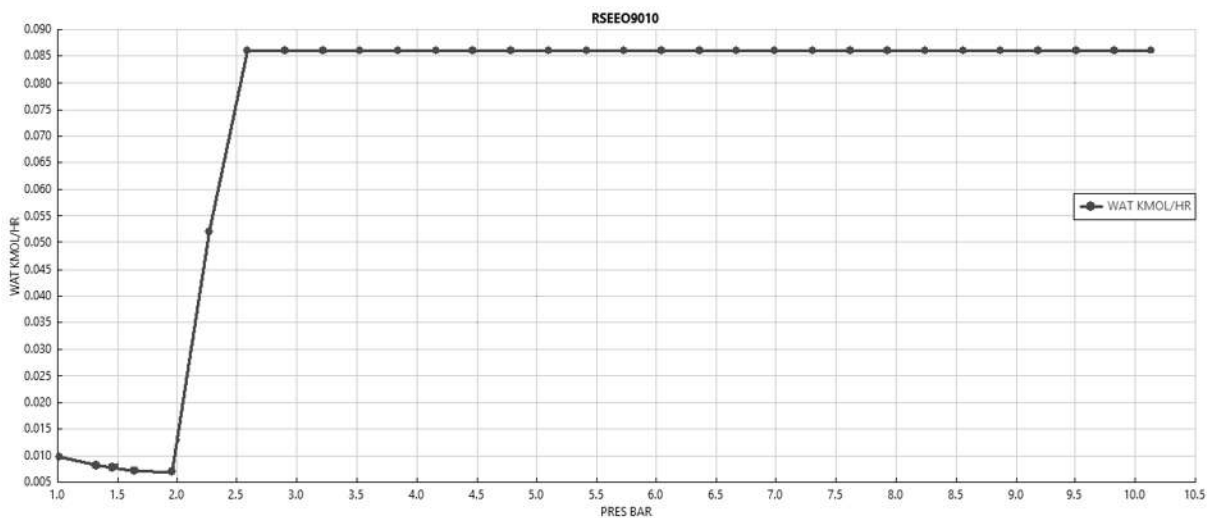
**Figura 5.8. Análisis de sensibilidad tiempo de residencia RSEEO2080.**

En la Figura 5.8, se observa la influencia del tiempo de residencia en la cantidad de agua a la salida del reactor. Desde 0.25 a 1 h no hay cambio significativo en la

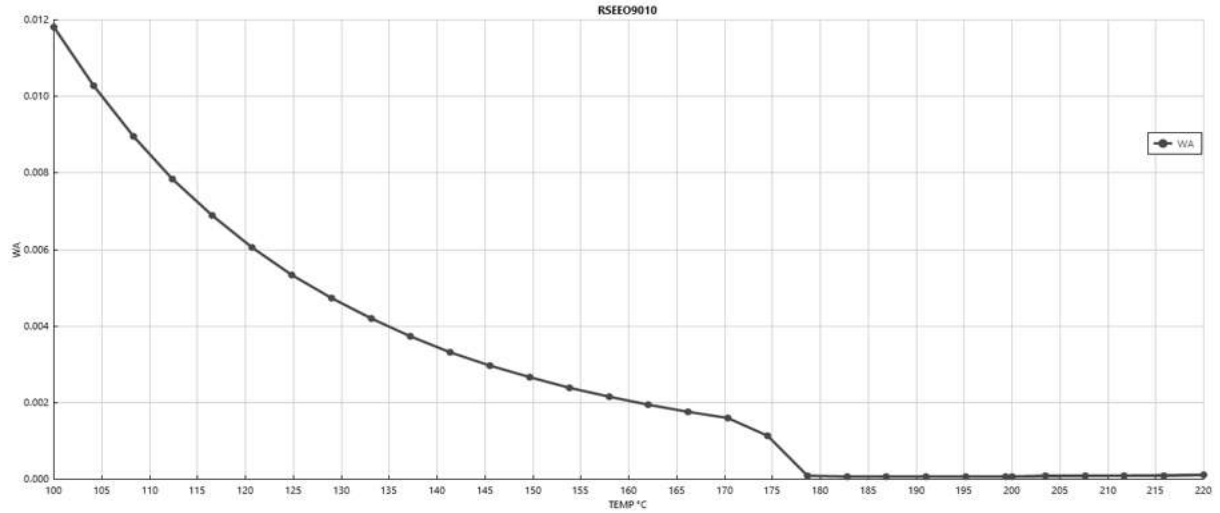
concentración de agua, pero si hay un aumento considerable en el volumen del reactor lo cual impacta en los costos. Por lo tanto, se debe tomar un punto cercano a 0.25 h.



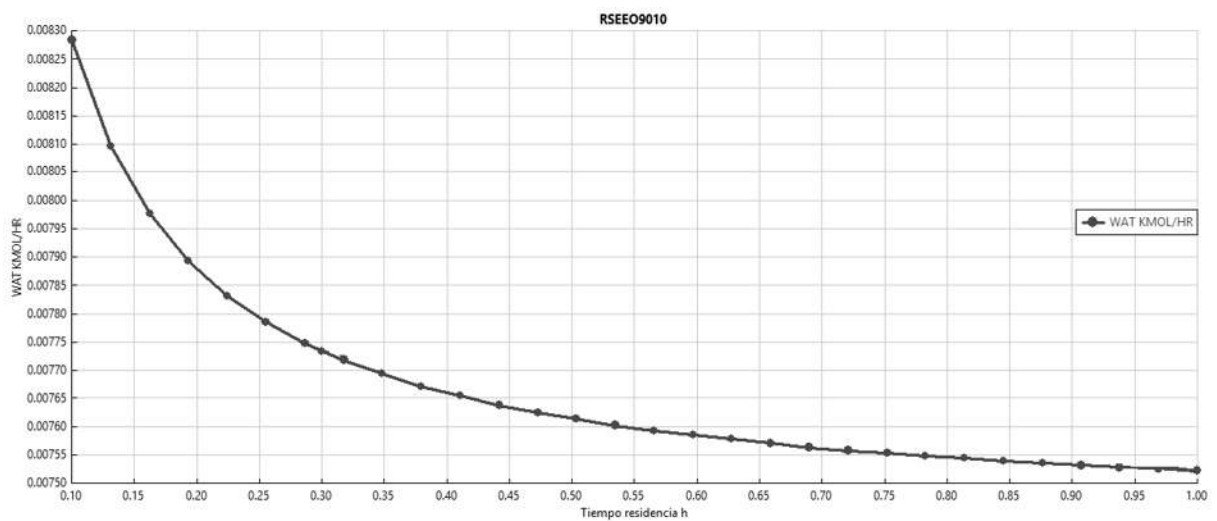
**Figura 5.9. Análisis de sensibilidad flujo de entrada óxido de etileno RSEE09010.**



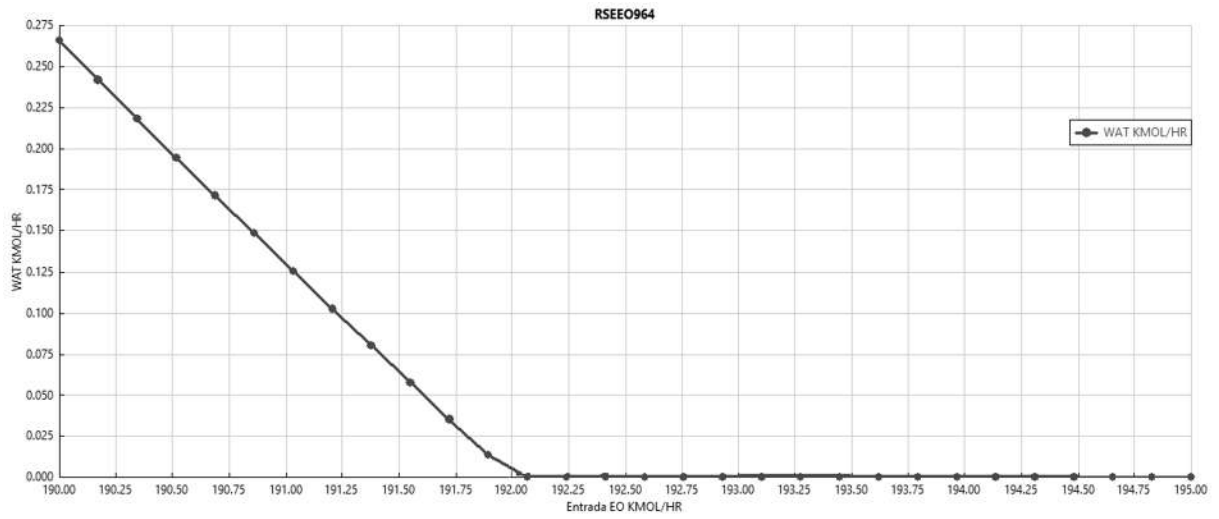
**Figura 5.10. Análisis de sensibilidad presión RSEE09010.**



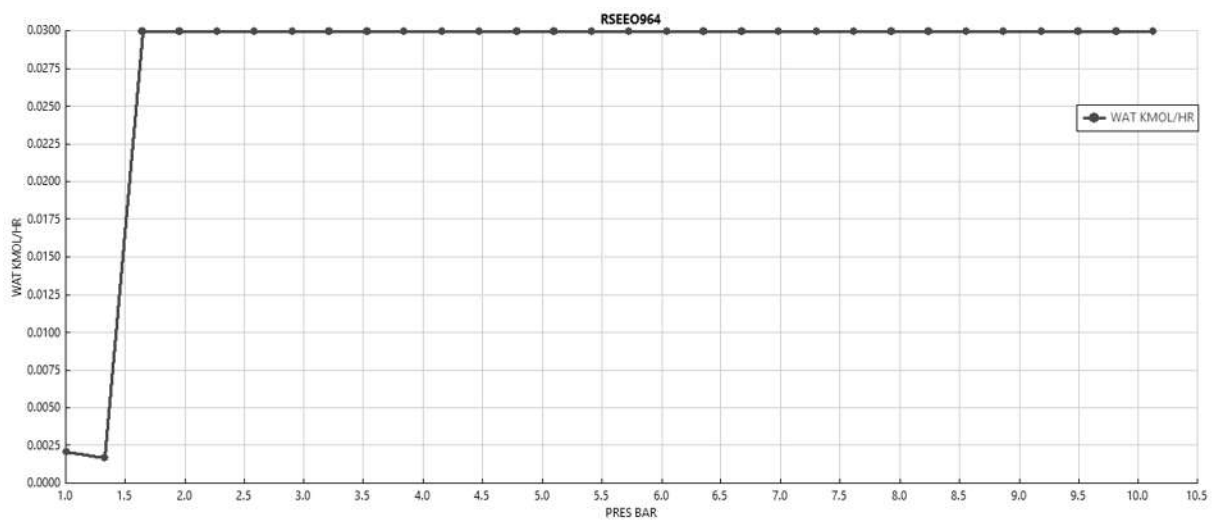
**Figura 5.11. Análisis de sensibilidad temperatura RSEE09010.**



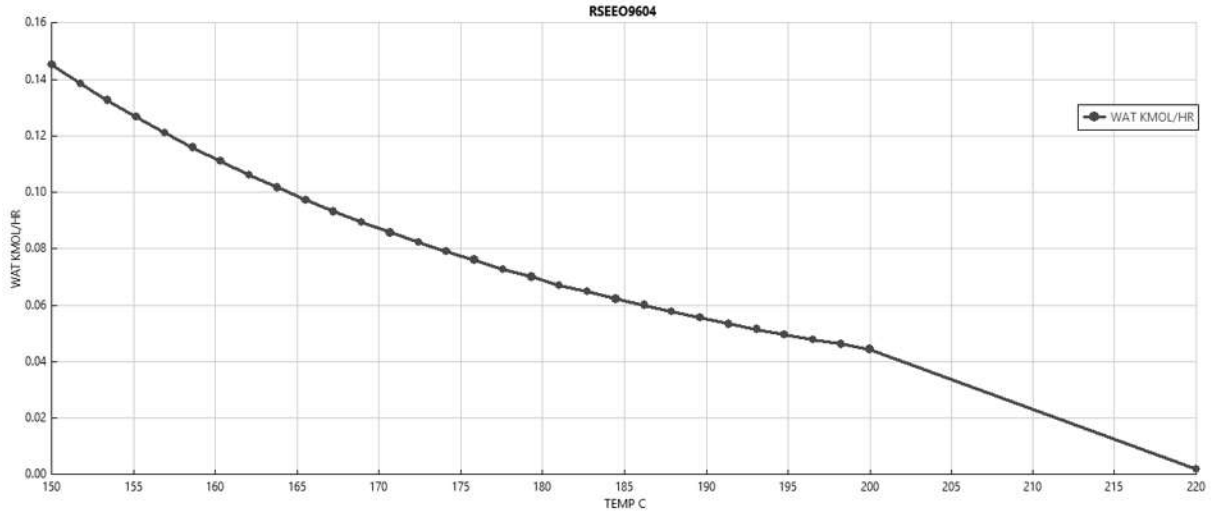
**Figura 5.12. Análisis de sensibilidad tiempo de residencia RSEE09010.**



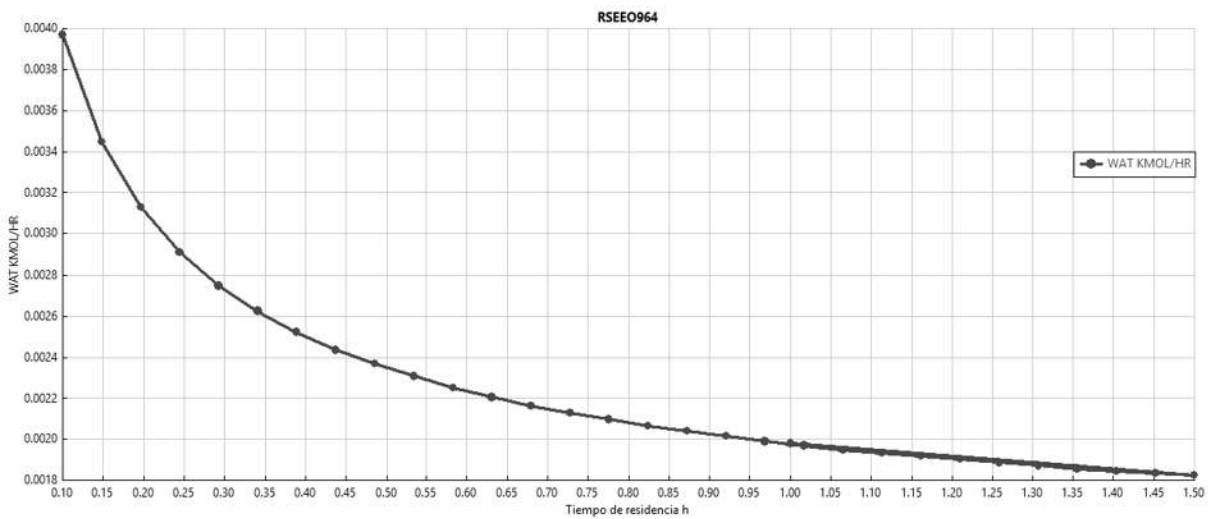
**Figura 5.13. Análisis de sensibilidad flujo de entrada óxido de etileno RSEE0964.**



**Figura 5.14. Análisis de sensibilidad presión RSEE0964.**



**Figura 5.15. Análisis de sensibilidad temperatura RSEEO9604**



**Figura 5.16. Análisis de sensibilidad tiempo de residencia RSEEO964**

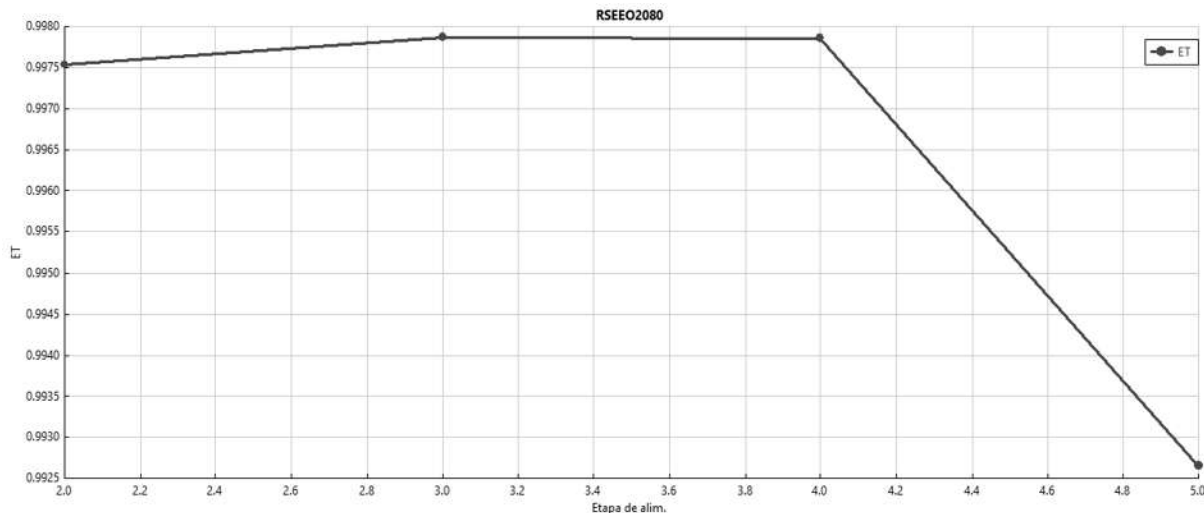
En la Tabla 5.4, se muestran los parámetros de proceso finales para los reactores, resultado del análisis de sensibilidad.

**Tabla 5.4. Valores finales para los reactores en distintas configuraciones.**

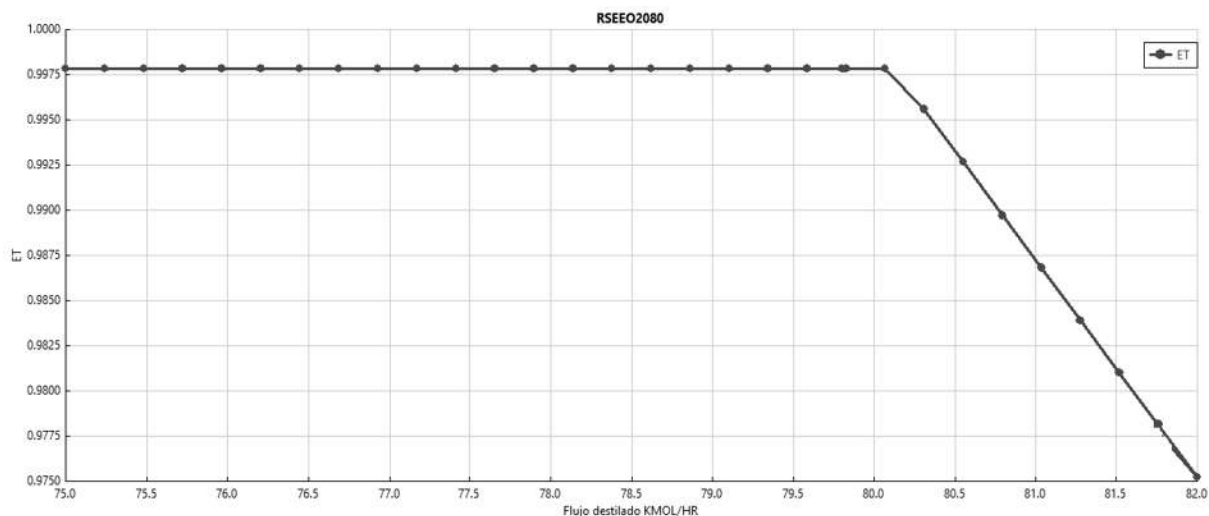
	RSEEO2080	RSEEO9010	RSEEO964
<b>Volumen de reactor (m<sup>3</sup>)</b>	5	43.54	19.41
<b>Temperatura del reactor (°C)</b>	140	200	220
<b>Entrada de EO (kmol/h)</b>	39.8	179.95	191.99
<b>Entrada de etanol-agua (kmol/h)</b>	100	100	100
<b>Presión del reactor (atm)</b>	1.44	1.44	1.44
<b>Servicio reactor</b>	Generación de vapor baja presión	Generación de vapor media presión	Generación de vapor media presión

### **5.2.3 Diseño de la torre de destilación en el sistema óxido de etileno/etilenglicol.**

De la Figura 5.17 a la 5.25, se muestran los análisis de sensibilidad de los parámetros señalados en la metodología.

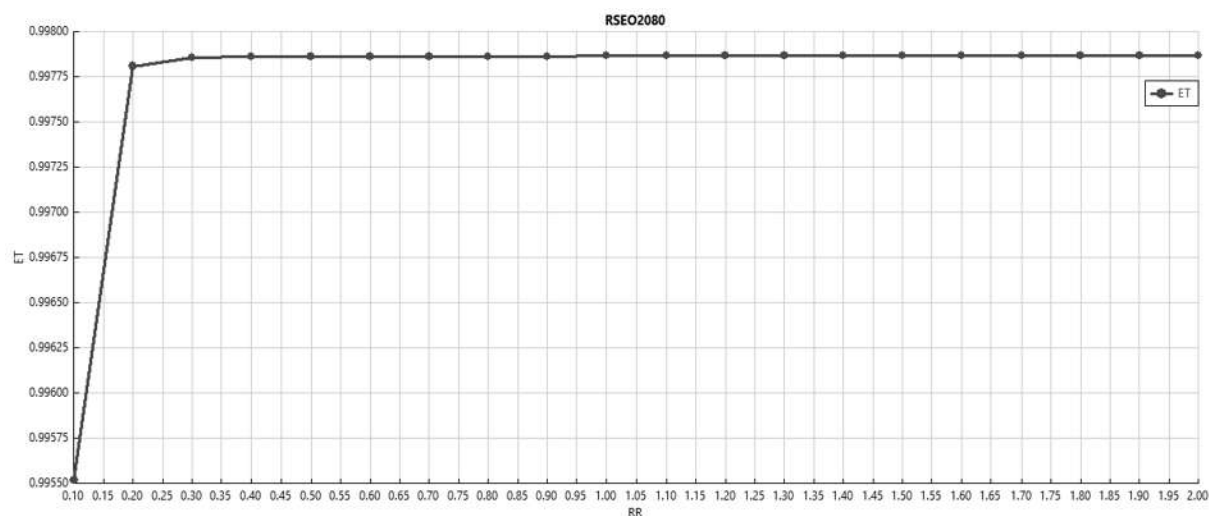
**Figura 5.17. Análisis de sensibilidad etapa de alimentación RSEEO2080.**

En la Figura 5.17, se observa la influencia de la etapa de alimentación en la pureza del etanol anhidro a la salida del domo de la columna de destilación. Se observa que la mejor opción es la etapa 4 de la columna.



**Figura 5.18. Análisis de sensibilidad flujo destilado RSEEO2080**

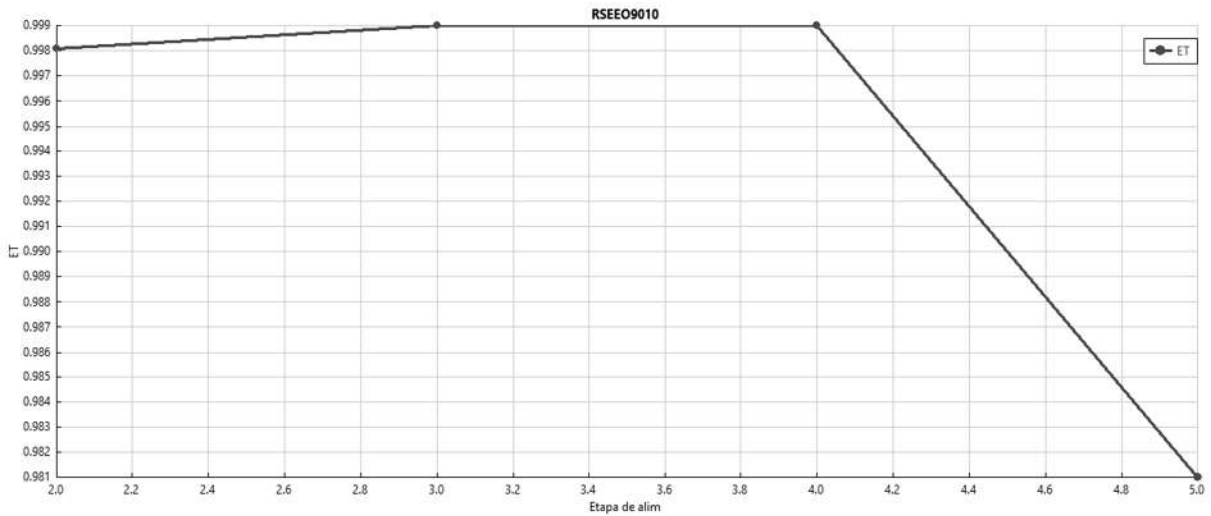
En la Figura 5.18, se observa la influencia del flujo de destilado en la pureza del etanol anhidro a la salida del domo de la columna de destilación. Se observa que la mejor opción se encuentra a una velocidad de 79 – 81 Kmol/h. Esto se debe a que a menores velocidades se puede obtener la misma pureza, pero afecta de forma negativa la recuperación del biocombustible.



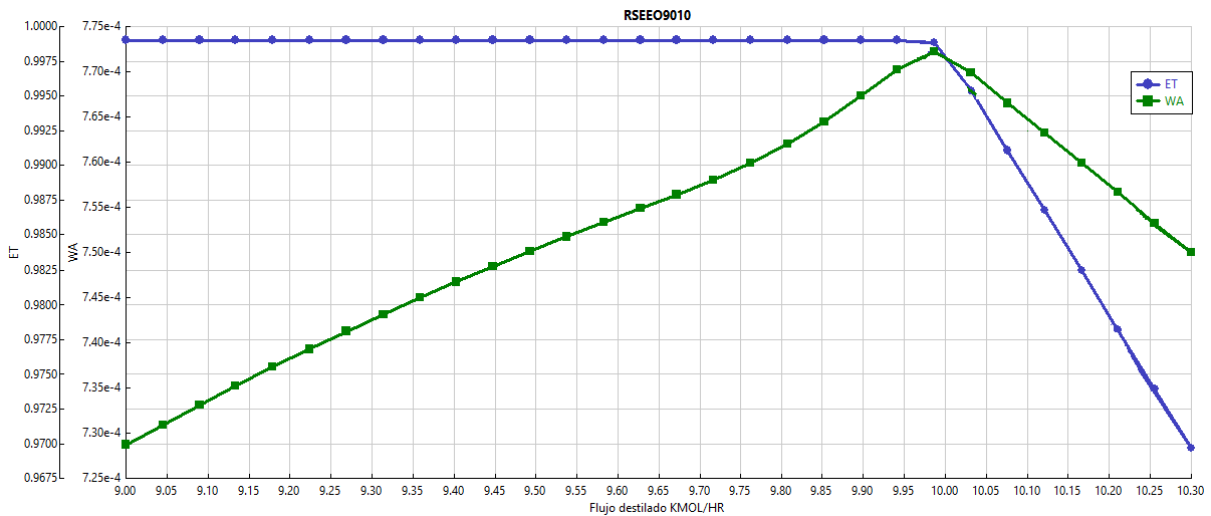
**Figura 5.19. Análisis de sensibilidad relación de reflujo RSEEO2080.**

En la Figura 5.19, se observa la influencia de la relación de reflujo en la pureza del etanol anhidro. El análisis muestra que aumentar la relación no tiene un gran efecto en el parámetro de interés. Sin embargo, entre mayor sea la relación de reflujo, mayor

será el costo del equipo debido al tanque de reflujo; Así como, la carga energética empleada para la recirculación. Por lo tanto, se consideran relaciones menores a 0.2.



**Figura 5.20. Análisis de sensibilidad etapa de alimentación RSEE09010.**



**Figura 5.21. Análisis de sensibilidad flujo de destilado RSEE09010.**



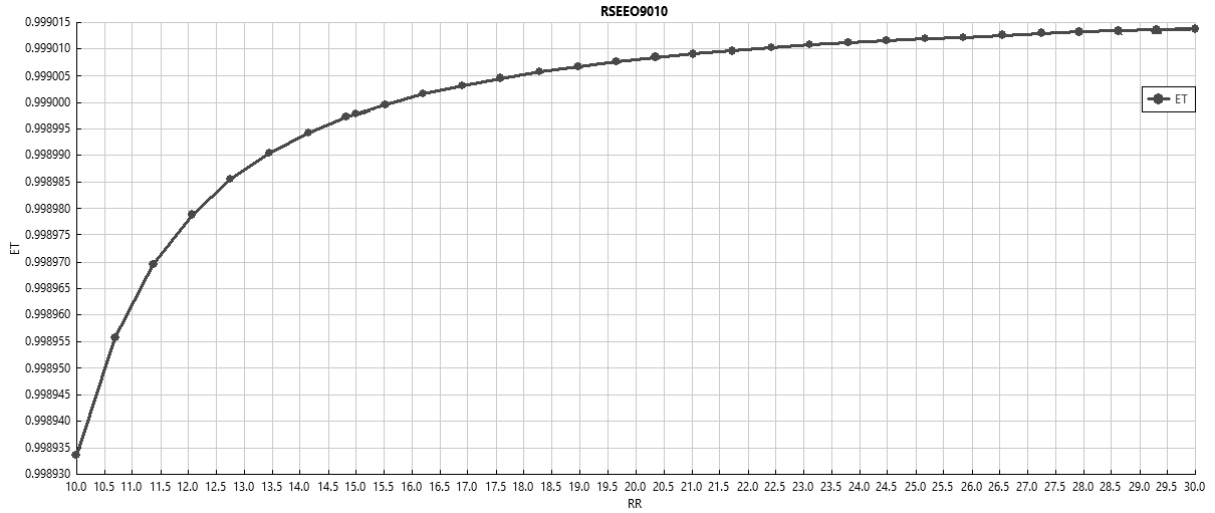


Figura 5.22. Análisis de sensibilidad relación de reflujo RSEEO9010.

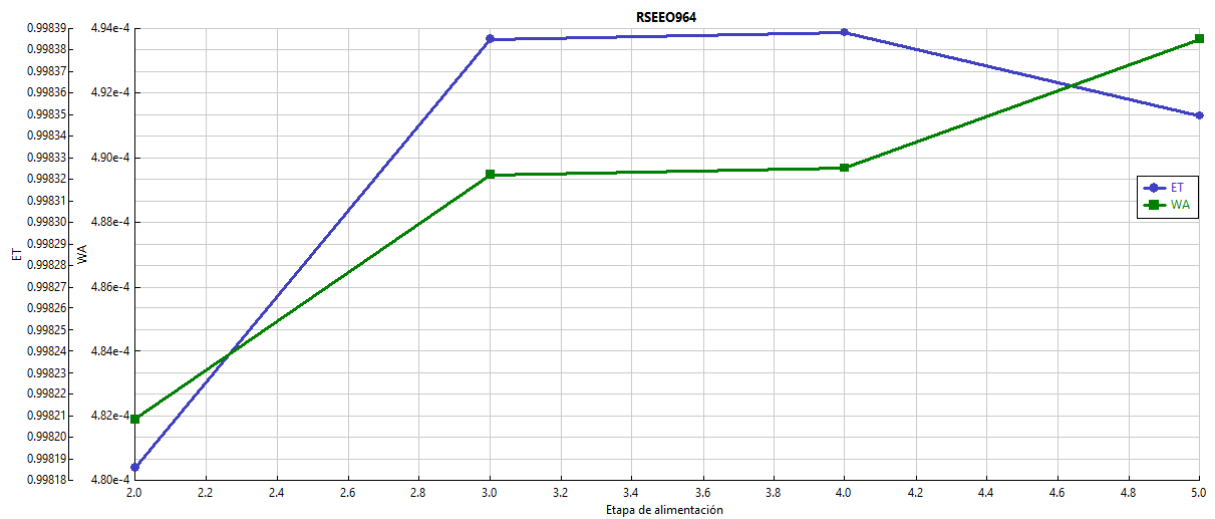
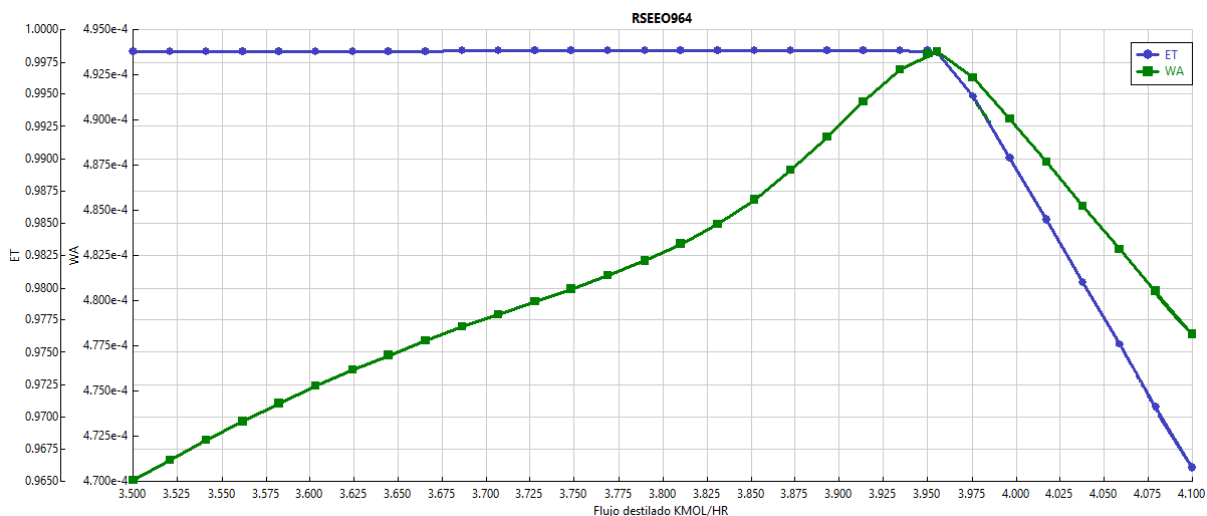
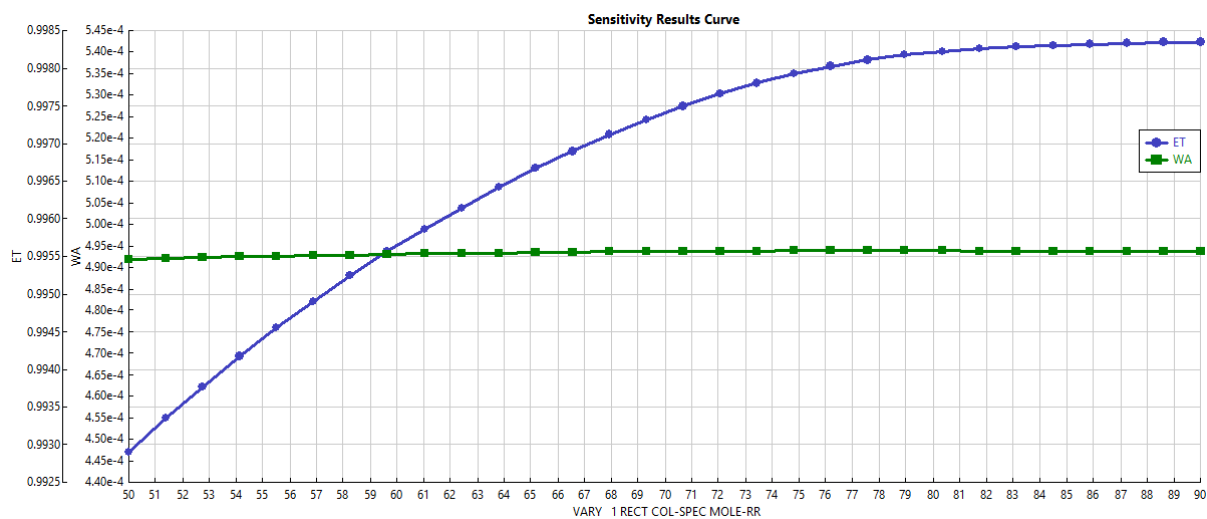


Figura 5.23. Análisis de sensibilidad etapa de alimentación RSEEO964.



**Figura 5.24. Análisis de sensibilidad flujo de destilado RSEE0964.**



**Figura 5.25. Análisis de sensibilidad relación de reflujo RSEE0964.**

Para trabajar bajo concentraciones diluidas de etanol es indispensable utilizar relaciones de reflujo elevadas. Principalmente, se debe porque se tiene un gran flujo molar de glicoles a la salida del domo y hay que regresarlo para obtener la pureza deseada.

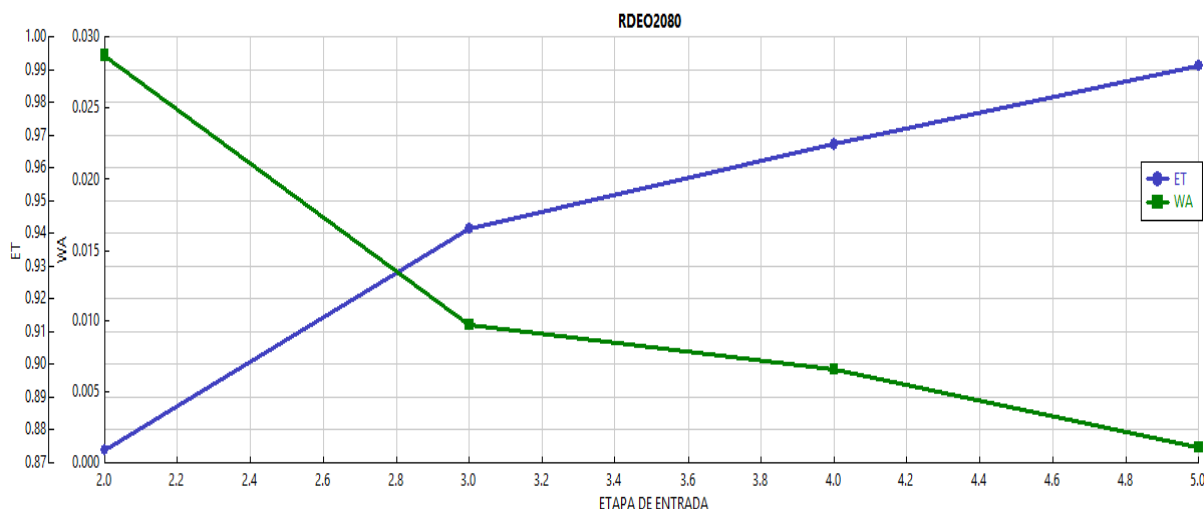
En la Tabla 5.5, se muestran los valores finales de las variables de proceso para las torres de destilación en los distintos sistemas, resultado del análisis de sensibilidad.

**Tabla 5.5. Valores finales para las columnas de destilación a distintas configuraciones**

	<b>RSEEO2080</b>	<b>RSEEO9010</b>	<b>RSEEO964</b>
<b>Numero de platos</b>	5	5	5
<b>Plato de entrada</b>	4	4	5
<b>Flujo de destilado (kmol/h)</b>	79.8	9.97	3.95
<b>Relación de reflujo</b>	0.6	15	90
<b>Presión (atm)</b>	1	1	1
<b>Servicio condensador torre</b>	Refrigerante 1	Refrigerante 1	Refrigerante 1
<b>Servicio ebullición torre</b>	Vapor alta presión	Aceite caliente	Aceite caliente
<b>Servicio condensador EG</b>	Generación de vapor baja presión	Generación de vapor baja presión	Generación de vapor baja presión

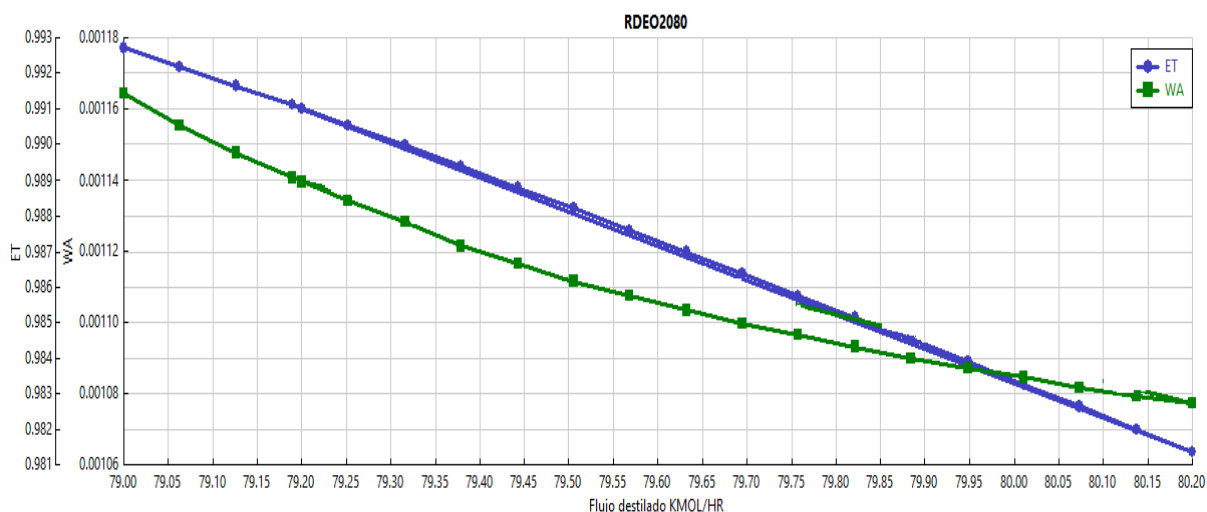
#### **5.2.4 Diseño de la destilación reactiva en el sistema óxido de etileno/etilenglicol.**

De la Figura 5.26 a la 5.43, se muestran los análisis de sensibilidad de los parámetros señalados en la metodología.



**Figura 5.26. Análisis de sensibilidad etapa de entrada RDEO2080.**

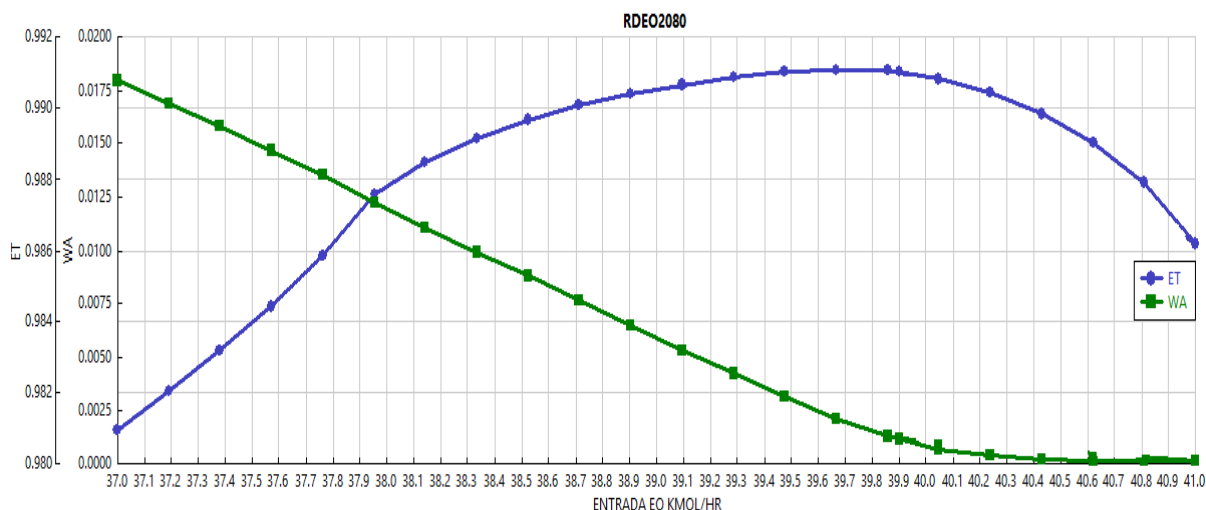
En la Figura 5.26, se observa la influencia de la etapa de alimentación en la pureza del etanol anhidro a la salida del domo de la columna de destilación. Se observa que la mejor opción es la etapa 5 de la columna la cual representa el ebullición de la torre. Este funge como un reactor batch dentro de la torre de destilación reactiva. Esta elección permite intensificar el proceso por la reducción de etapas en la columna.



**Figura 5.27. Análisis de sensibilidad flujo de destilado RDEO2080.**

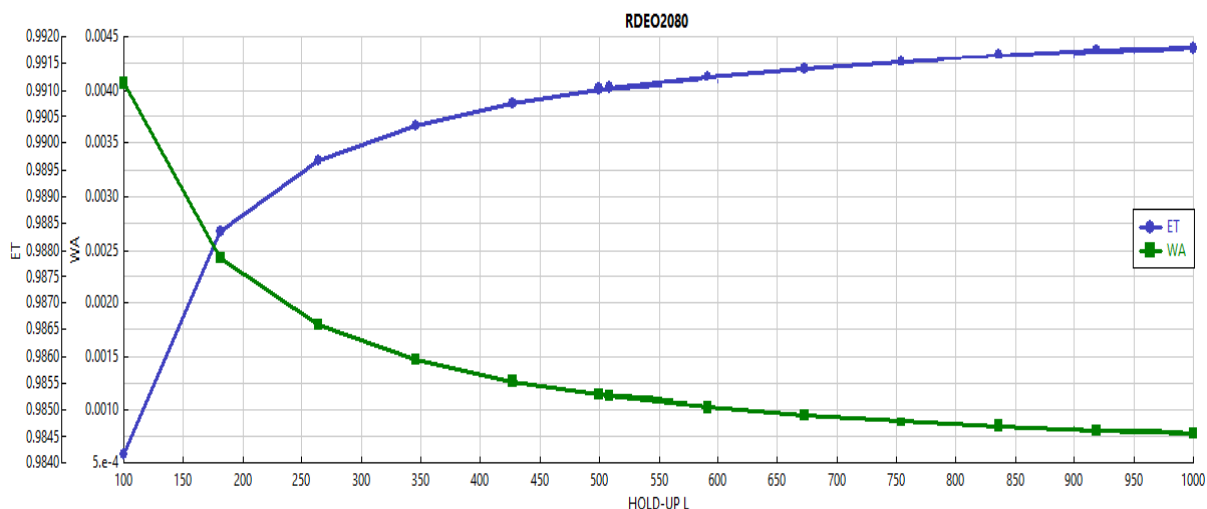
En la Figura 5.27, se observa la influencia del flujo de destilado en la pureza del etanol anhidro a la salida del domo de la columna de destilación. Se observa que la mejor opción se encuentra a una velocidad de 79 – 79.5 Kmol/h. Esto se debe a que a menores velocidades se puede obtener la misma pureza, pero afecta de forma negativa

la recuperación del biocombustible. Dicha Figura muestra que la concentración de agua tiene la misma tendencia que el etanol. Sin embargo, el aumento de agua es muy pequeño que no presenta problema para el objetivo del proceso.



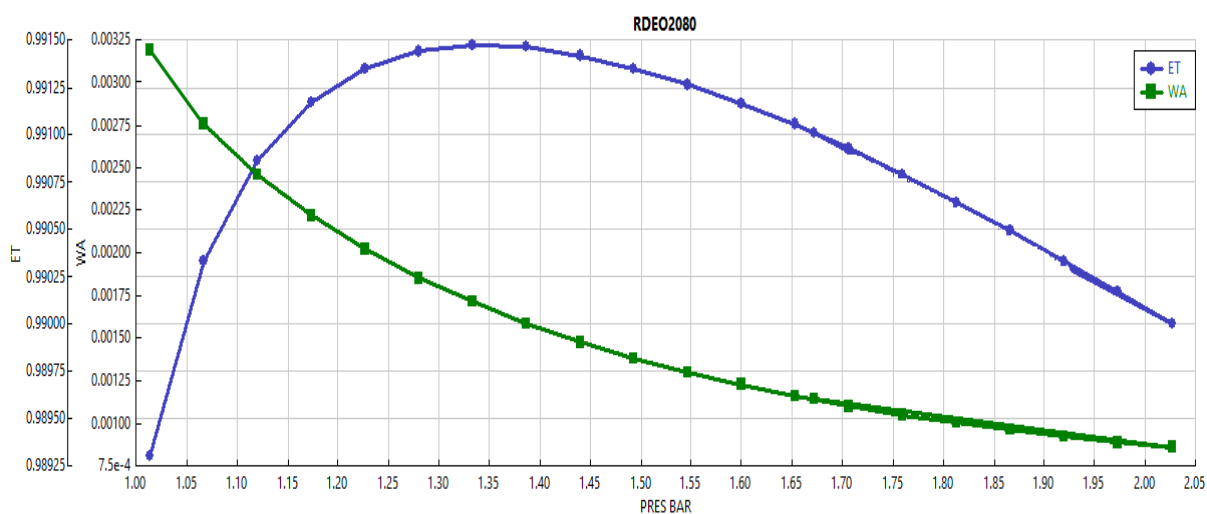
**Figura 5.28. Análisis de sensibilidad flujo de entrada óxido de etileno RDEO2080.**

En la Figura 5.28, se observa como disminuye cantidad de agua, a la salida del domo de la torre de destilación reactiva, conforme aumenta el flujo de óxido de etileno hasta su agotamiento. Sin embargo, se debe tomar la mínima cantidad posible para eliminar el agua ya que un exceso de óxido de etileno genera una etapa adicional en el proceso de separación para su remoción del flujo de destilado y promueve una producción extra de dietilenglicol debido a la reacción secundaria. La Figura 5.28 incluye el consumo de óxido de etileno en la transformación del etilenglicol a dietilenglicol. El flujo de entrada para la operación a la concentración problema se encuentra entre 39.5 – 39.9 Kmol/h.



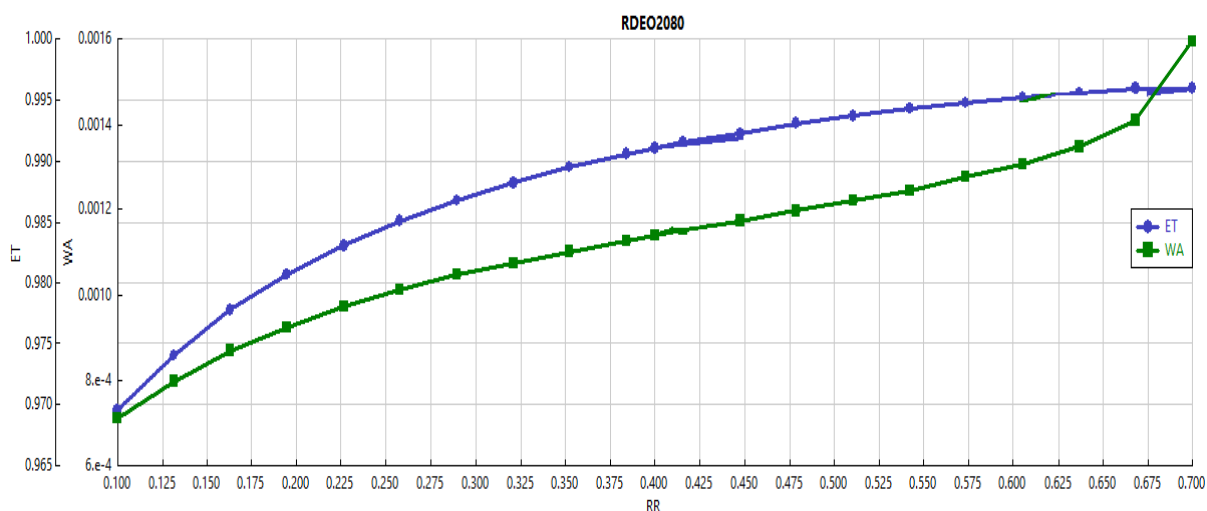
**Figura 5.29. Análisis de sensibilidad hold up RDEO2080**

En la Figura 5.29, se observa la influencia del hold up del líquido en la columna de destilación. Esta variable es muy importante debido a que influye de manera directa en la reacción proporcionando un tiempo de residencia dentro de la torre. La Figura 5.29 muestra que conforme aumenta el hold up, aumenta la pureza del etanol anhidro en el domo. Sin embargo, en valores de 500 a 1 000 litros por etapa evidencia que el aumento ya no es tan significativo a nivel pureza, pero si a nivel volumen el cual repercute de forma directa en el costo de capital. Por ende, se toman en cuenta valores menores a 500 l.



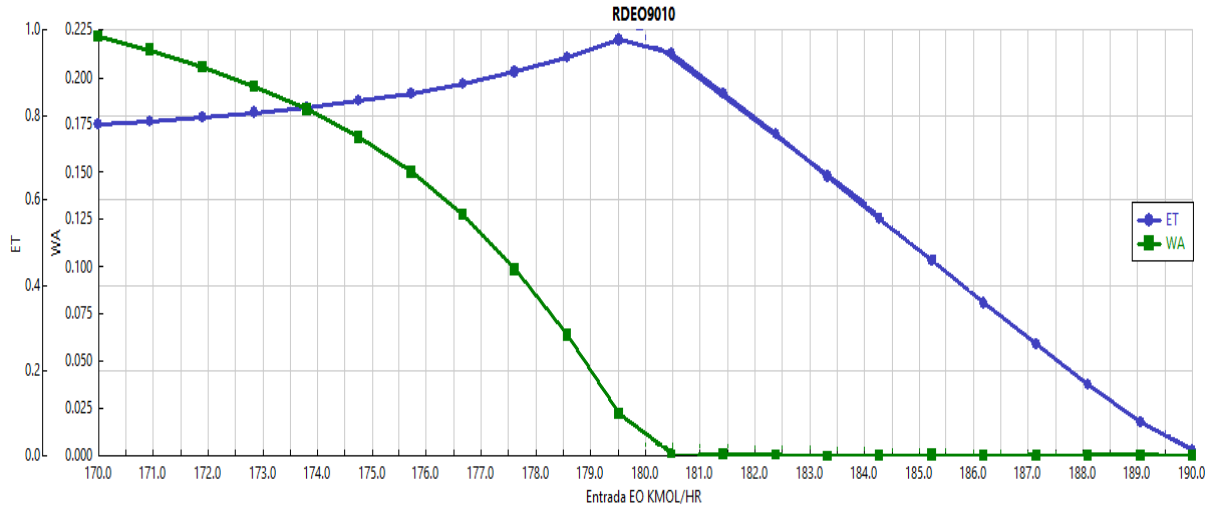
**Figura 5.30. Análisis de sensibilidad presión RDEO2080.**

En la Figura 5.30, se observa la influencia de la presión en la cantidad de agua a la salida del domo de la columna. La tendencia la podemos atribuir a que a bajas presiones los reactivos, agua y óxido de etileno, se encuentran en fase vapor lo cual favorece la reacción. A presiones sobre 1.7 atm., tenemos una disminución de la pureza de etanol anhidro a la salida debido a que es más lenta la reacción en fase líquida y afecta el equilibrio de fases, parámetro sumamente importante para la separación en la torre. Por lo tanto, La presión de operación debe situarse alrededor de 1-1.7 atm. A esta dilución de etanol.

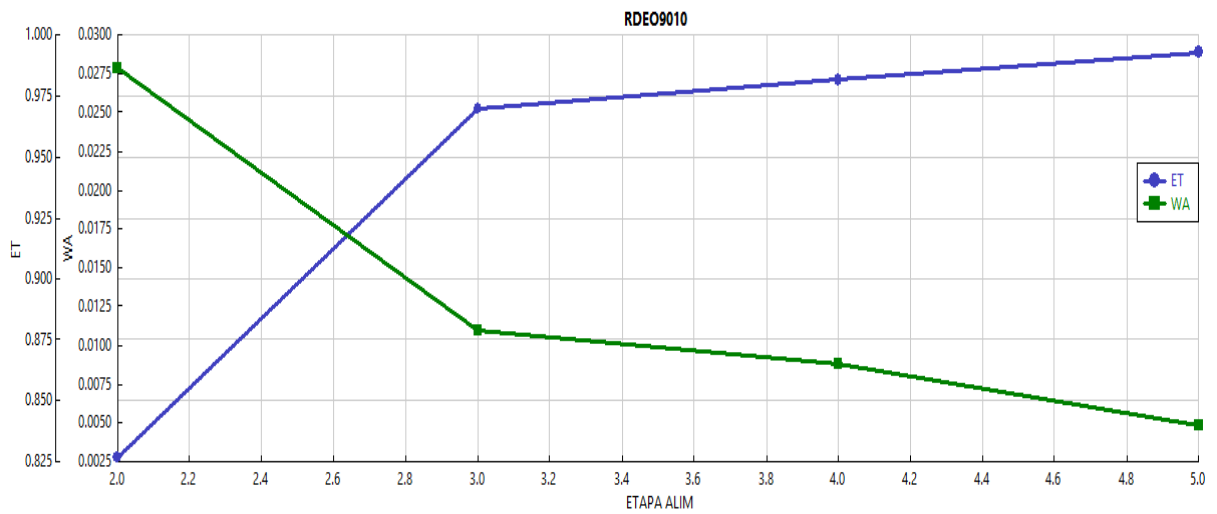


**Figura 5.31. Análisis de sensibilidad relación de reflujo RDEO2080.**

En la Figura 5.31, se observa la influencia de la relación de reflujo en la pureza del etanol anhidro. El análisis muestra que aumentar la relación tiene un gran efecto en el parámetro de interés. Sin embargo, entre mayor sea la relación de reflujo, mayor será el costo del equipo debido al tanque de reflujo; Así como, la carga energética empleada para la recirculación. Por lo tanto, se consideran relaciones entre 0.35 y 0.6.



**Figura 5.32. Análisis de sensibilidad flujo de entrada óxido de etileno RDEO9010.**



**Figura 5.33. Análisis de sensibilidad etapa de alimentación RDEP9010.**



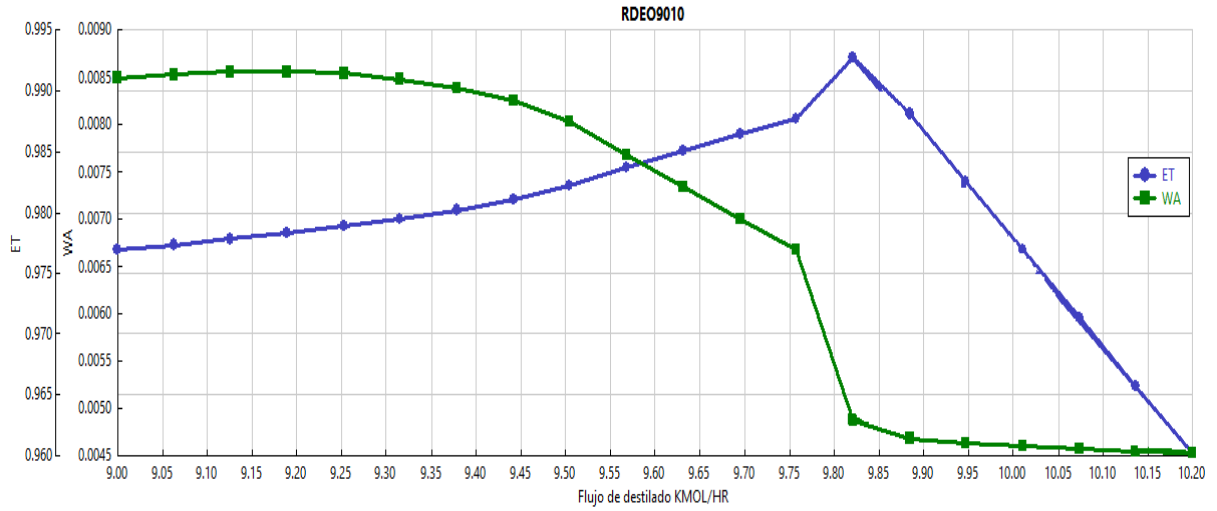


Figura 5.34. Análisis de sensibilidad flujo de destilado RDEO9010.

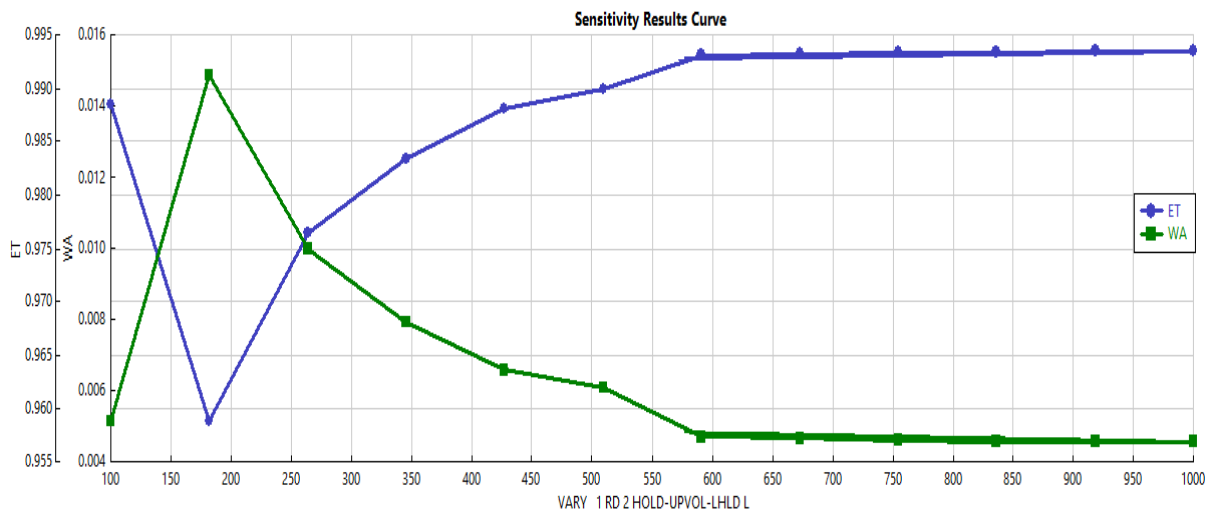


Figura 5.35. Análisis de sensibilidad hold up RDEO9010.

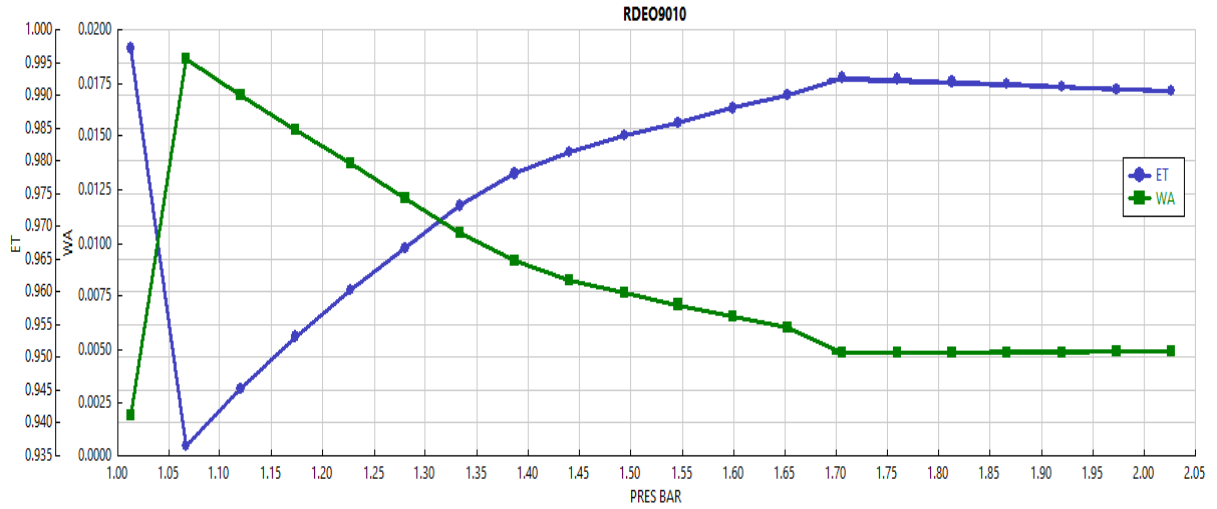


Figura 5.36. Análisis de sensibilidad presión RDEO9010.

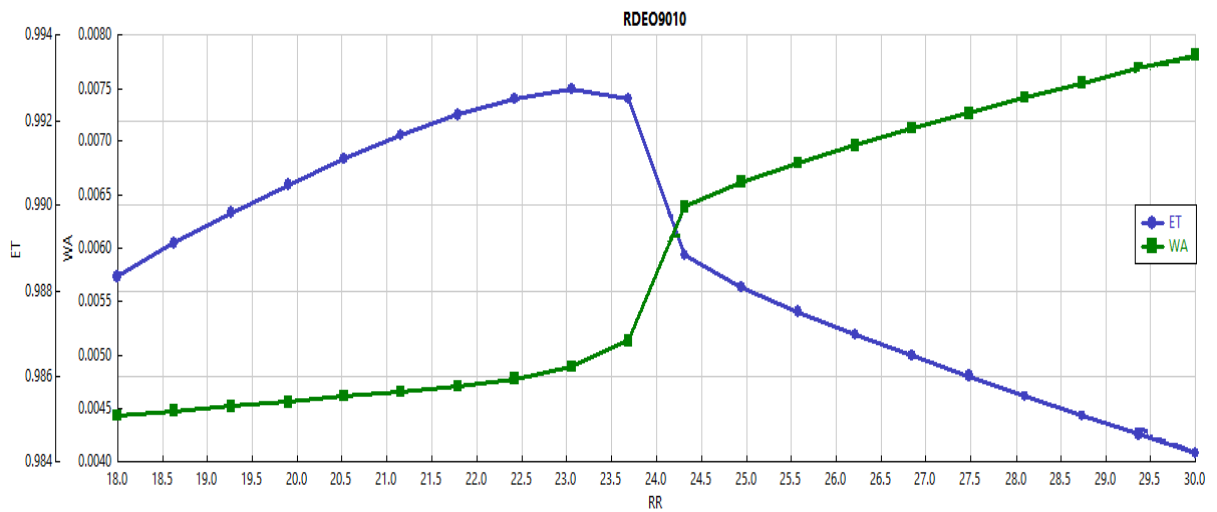
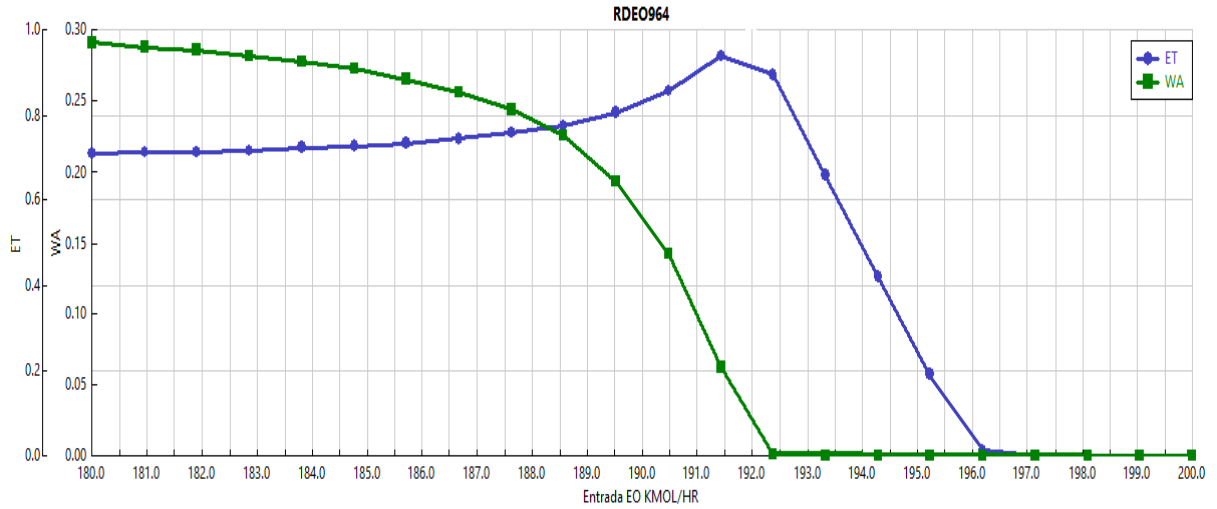
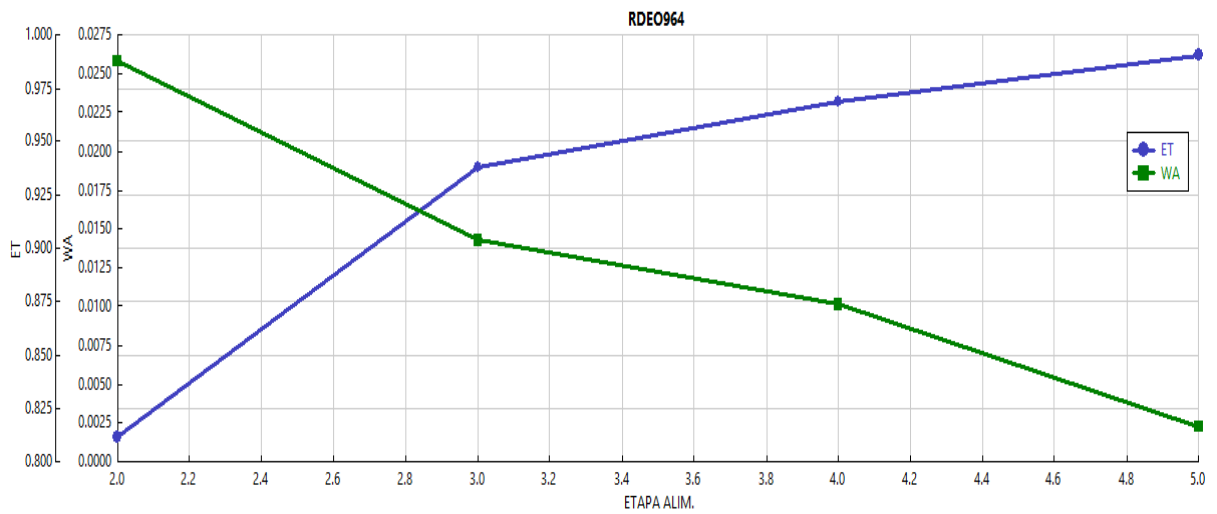


Figura 5.37. Análisis de sensibilidad relación de reflujo RDEO9010.



**Figura 5.38. Análisis de sensibilidad flujo de entrada óxido de etileno RDE0964.**



**Figura 5.39. Análisis de sensibilidad etapa de alimentación RDE0964.**

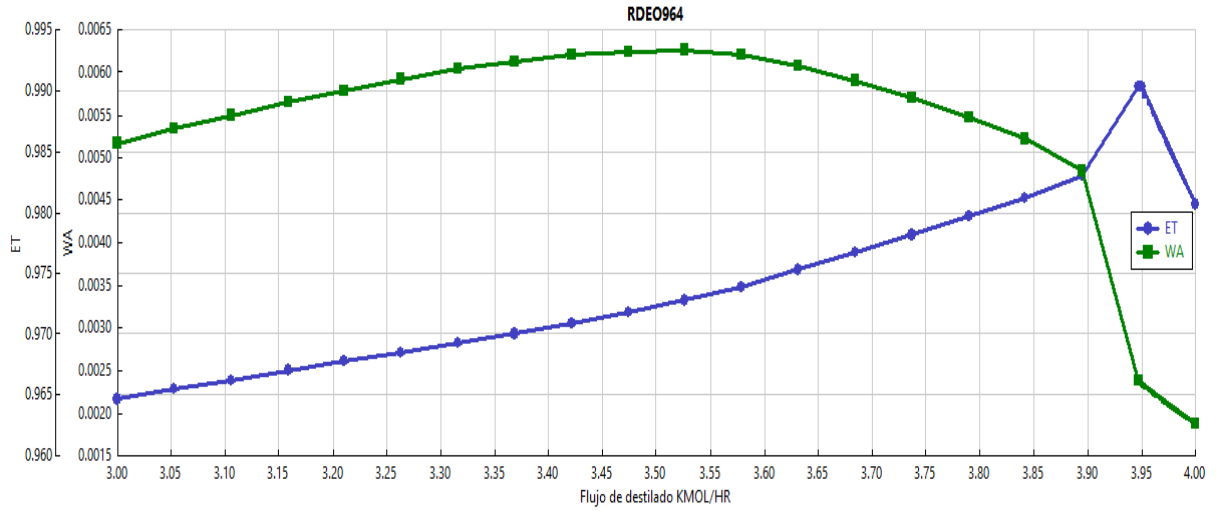


Figura 5.40. Análisis de sensibilidad flujo de destilado RDEO964.

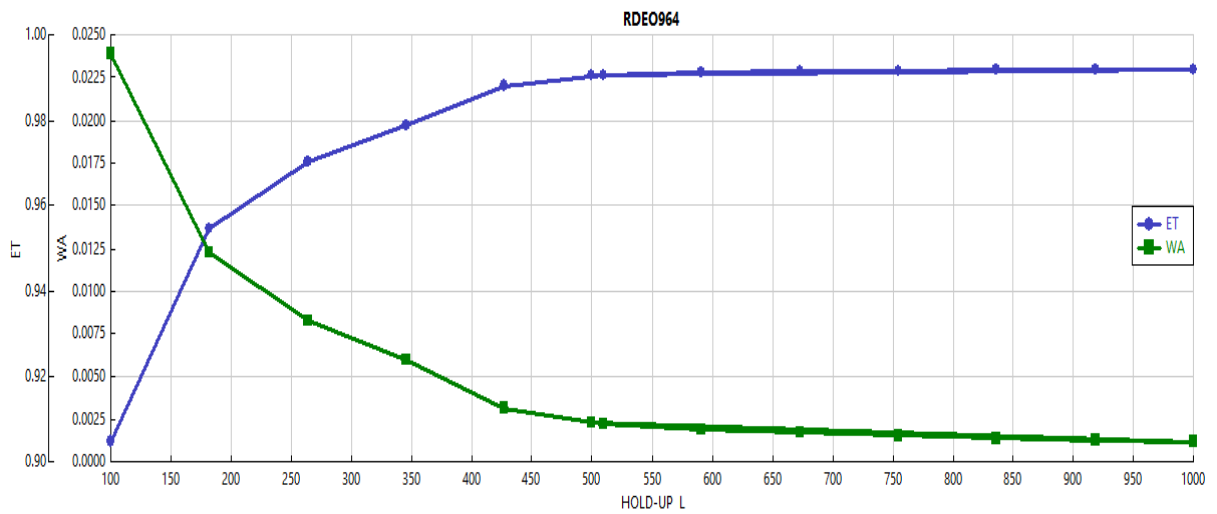
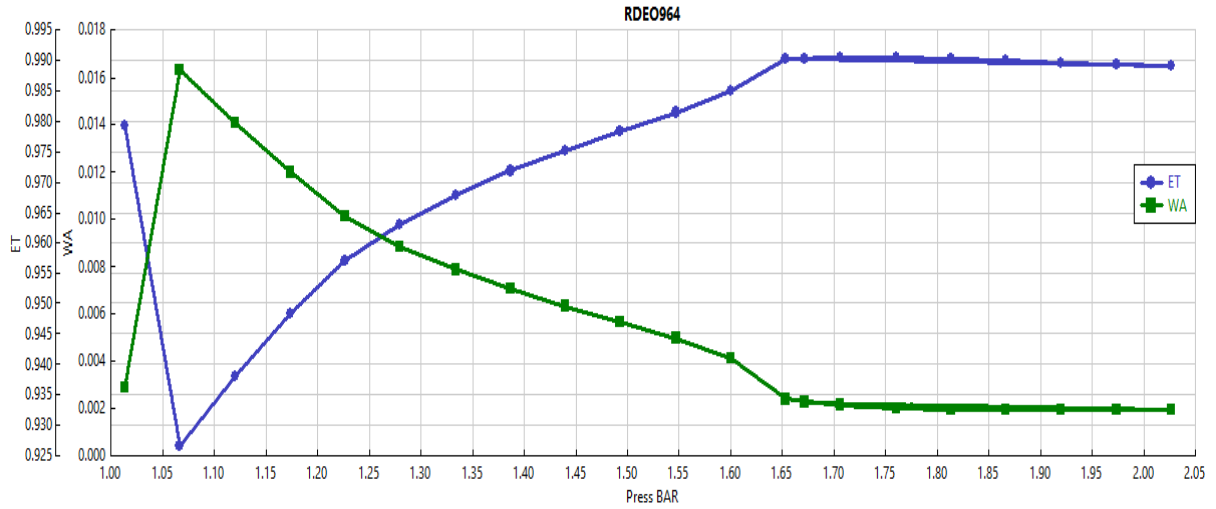
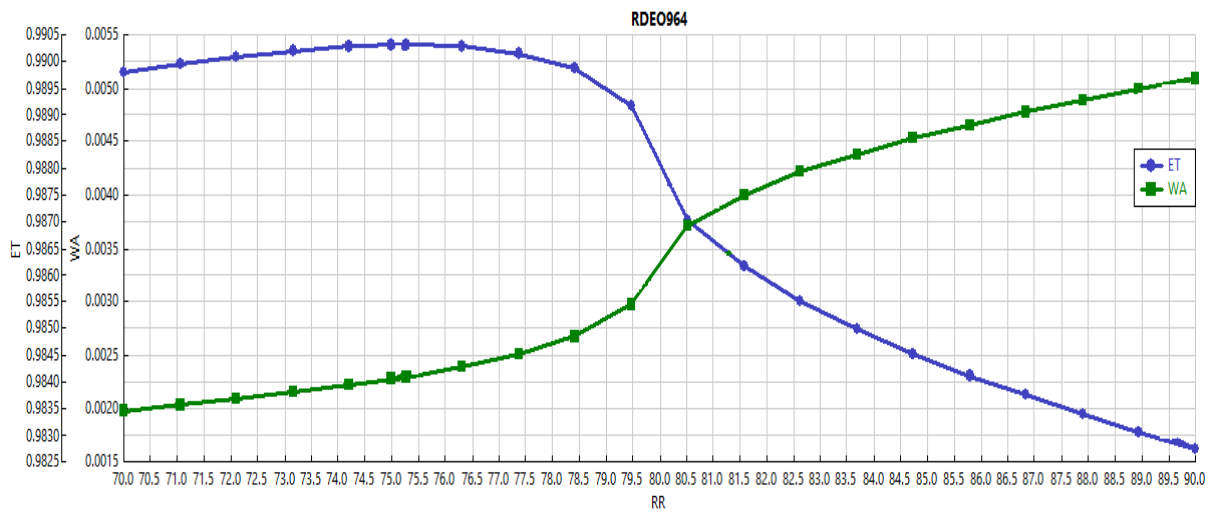


Figura 5.41. Análisis de sensibilidad hold up RDEO964.



**Figura 5.42. Análisis de sensibilidad presión RDE0964.**



**Figura 5.43. Análisis de sensibilidad relación de reflujo RDE0964.**

En la Tabla 5.6, se muestran los parámetros de proceso finales para las torres de destilación, resultado del análisis de sensibilidad.

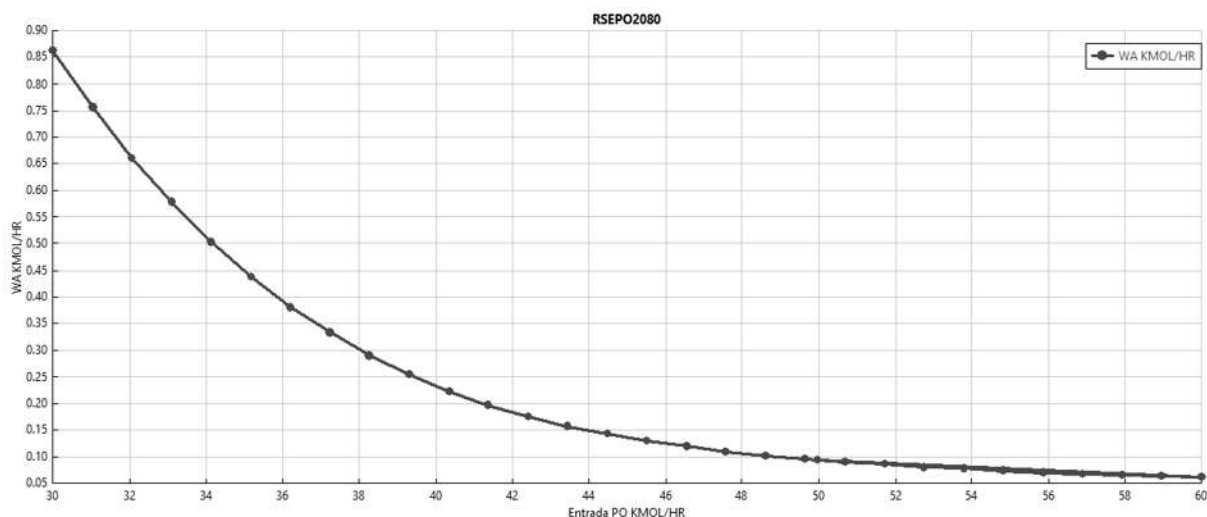
**Tabla 5.6. Valores finales para los sistemas de destilación reactiva a distintas configuraciones**

	<b>RDEO2080</b>	<b>RDEO9010</b>	<b>RDEO964</b>
<b>Numero de platos</b>	5	5	5
<b>Plato de entrada</b>	5	5	5
<b>Hold up (m3)</b>	0.5	0.5	0.5
<b>Platos reactivos</b>	2 al 4	2 al 4	2 al 4
<b>Flujo de destilado (kmol/h)</b>	79.2	9.82	3.95
<b>Relación de reflujo</b>	0.4	23	75
<b>Entrada de EO (kmol/h)</b>	39.9	179.9	191.99
<b>Presión de la torre (atm)</b>	1.65	1.65	1.65
<b>Servicio condensador</b>	Refrigerante 1	Refrigerante 1	Refrigerante 1
<b>Servicio ebullición</b>	Aceite caliente	Fuego	Fuego
<b>Servicio condensador corriente EG</b>	Generación de vapor baja presión	Generación de vapor baja presión	Generación de vapor baja presión

La etapa 1 de la torre de destilación reactiva corresponde al condensador y la 5 al ebullición. Este se toma como un reactor, por ende, también es una etapa reactiva.

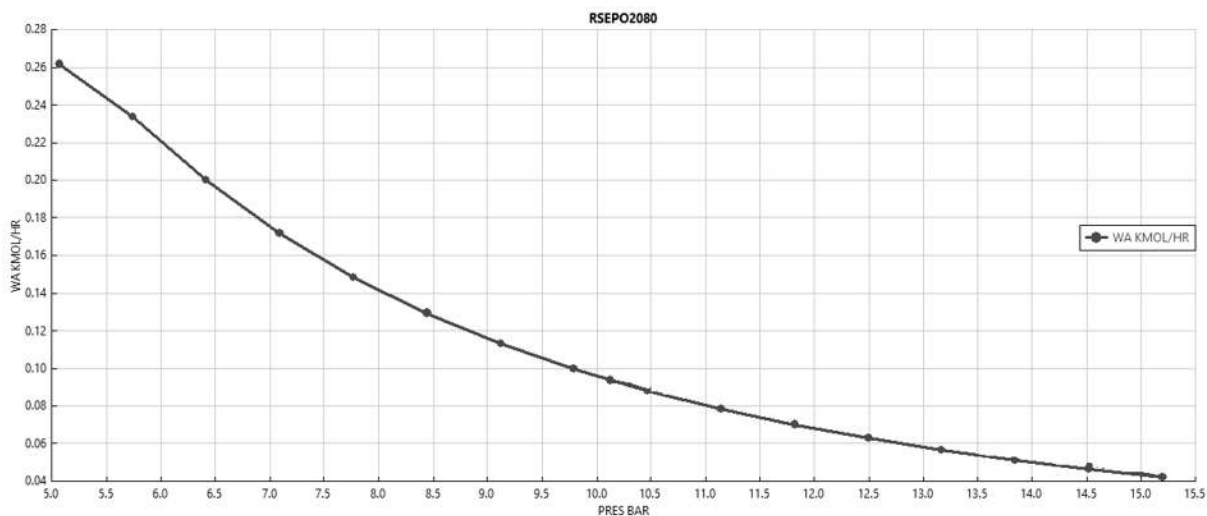
### 5.2.5 Diseño del reactor en el sistema óxido de propileno/propilenglicol.

De la Figura 5.44 a la 5.54, se muestran los análisis de sensibilidad de los parámetros señalados en la metodología.



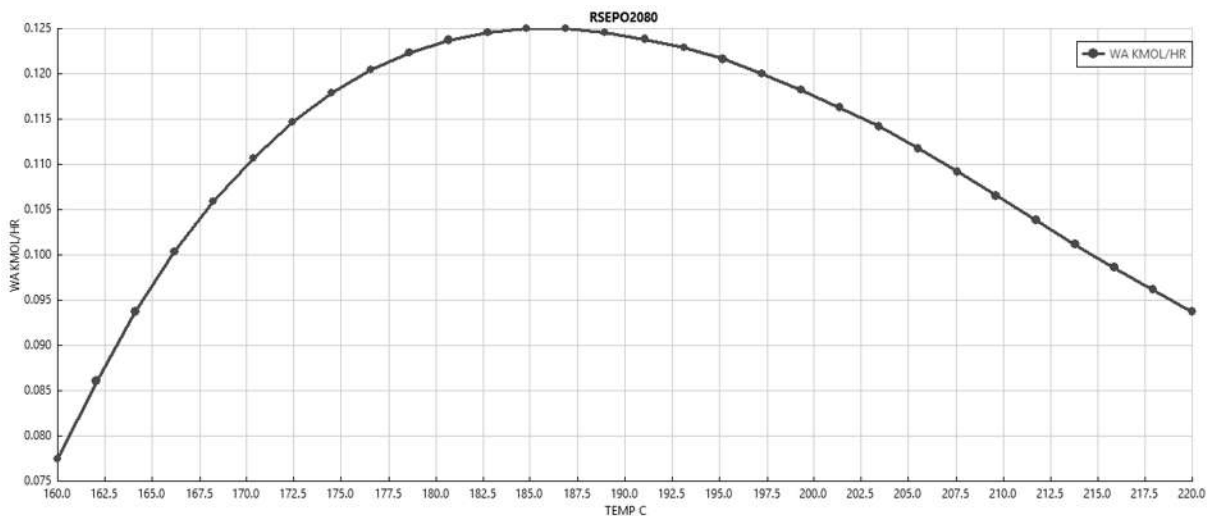
**Figura 5.44. Análisis de sensibilidad flujo de entrada óxido de propileno RSEPO2080.**

En la Figura 5.44, se observa como disminuye cantidad de agua, a la salida del reactor, conforme aumenta el flujo de óxido de propileno hasta su agotamiento. Sin embargo, se debe tomar la mínima cantidad posible para eliminar el agua ya que una gran cantidad en exceso de óxido de propileno genera un proceso más complejo en la etapa de separación para su remoción en la segunda columna de dicha fase. Además, promueve una producción extra de dipropilenglicol debido a la reacción secundaria. La Figura 5.44 incluye el consumo de óxido de propileno en la transformación del propilenglicol a dipropilenglicol. El flujo de entrada para la operación a la concentración problema se encuentra entre 45 – 55 Kmol/h.



**Figura 5.45. Análisis de sensibilidad presión RSEPO2080.**

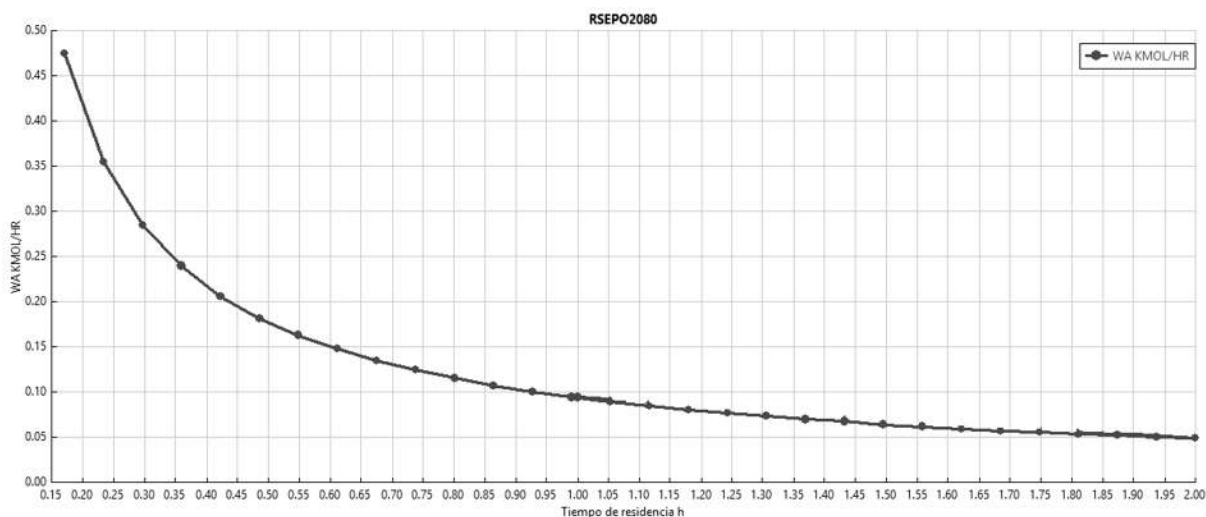
En la Figura 5.45, se observa la influencia de la presión en la cantidad de agua a la salida del reactor. La tendencia la podemos atribuir a que a presiones mayores sin pasar la de vapor, los reactivos agua y óxido de propileno, se encuentran en fase vapor y aumentan su energía molecular lo cual favorece por su cinética de reacción. Por lo tanto, la presión de operación debe situarse alrededor de 10 - 15 atm. A esta dilución de etanol.



**Figura 5.46. Análisis de sensibilidad temperatura RSEPO2080**

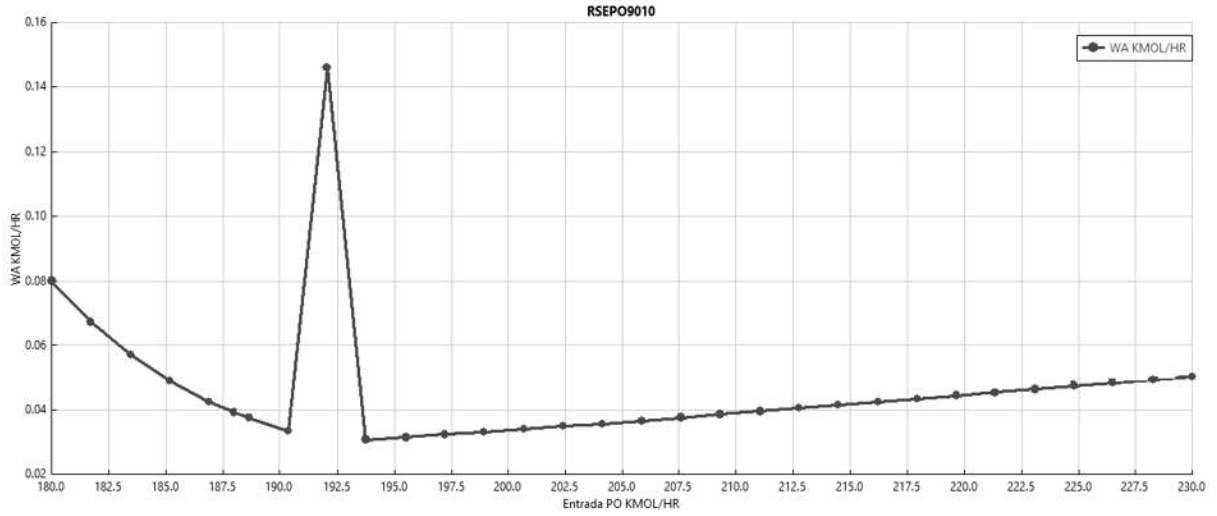


En la Figura 5.46, se observa la influencia de la temperatura en la cantidad de agua a la salida del reactor. Se tiene que a partir de 185 °C en adelante continúa disminuyendo el agua, pero de una manera significativa. Sin embargo, la temperatura no puede pasar de los 220 °C debido a que se promueve la descomposición de la olefina. Así que, la temperatura de operación del reactor se encuentra a 220 °C.

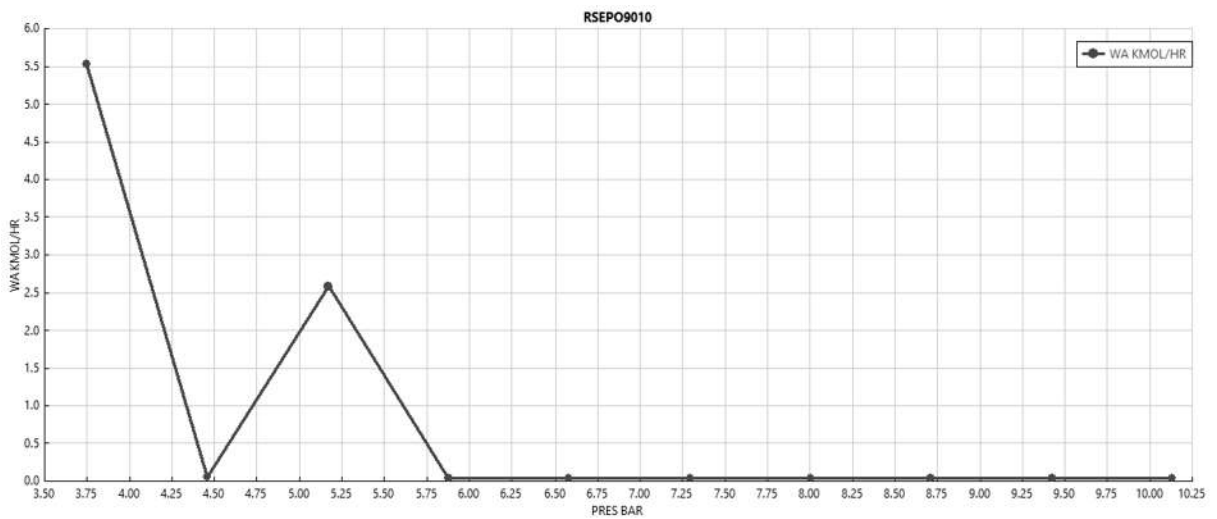


**Figura 5.47. Análisis de sensibilidad tiempo de residencia RSEPO2080.**

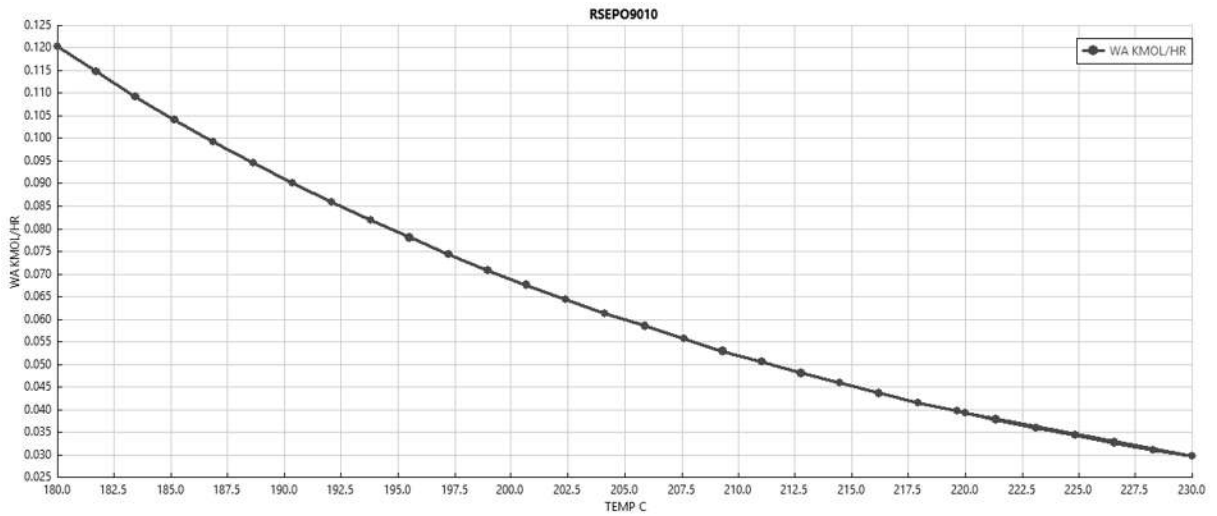
En la Figura 5.47, se observa la influencia del tiempo de residencia en la cantidad de agua a la salida del reactor. Desde 1 a 2 h no hay cambio significativo en la concentración de agua, pero si hay un aumento considerable en el volumen del reactor lo cual impacta en los costos. Por lo tanto, se debe tomar un punto cercano a 1 h.



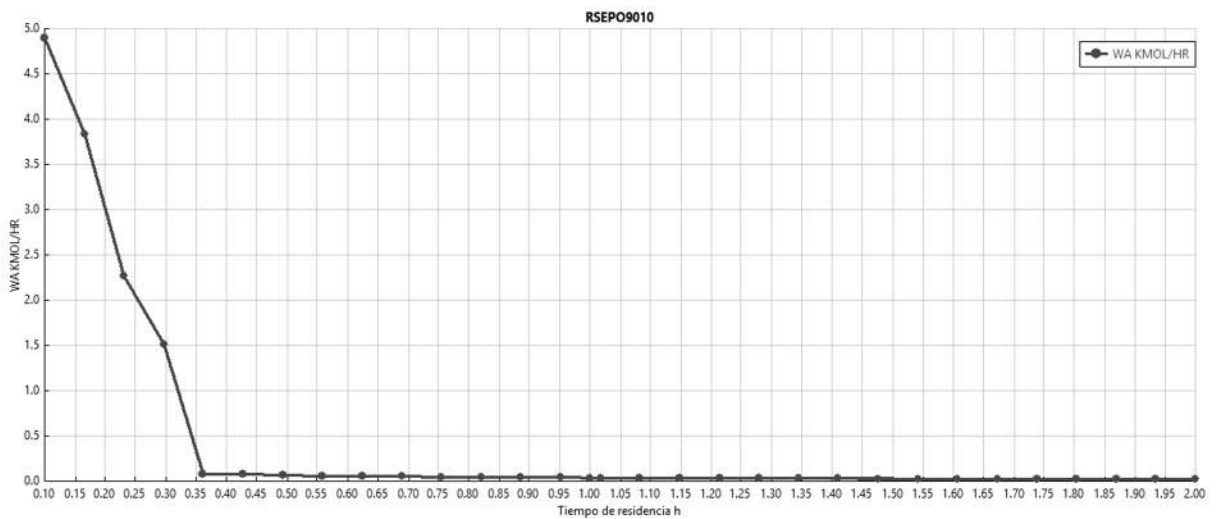
**Figura 5.48. Análisis de sensibilidad flujo de entrada óxido de propileno RSEPO9010.**



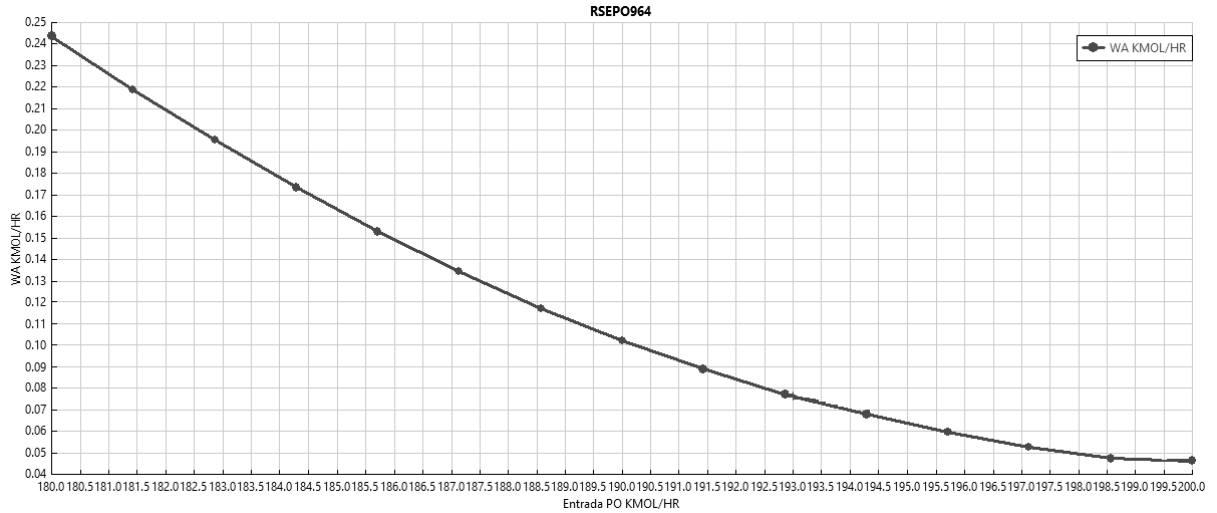
**Figura 5.49. Análisis de sensibilidad presión RSEPO9010.**



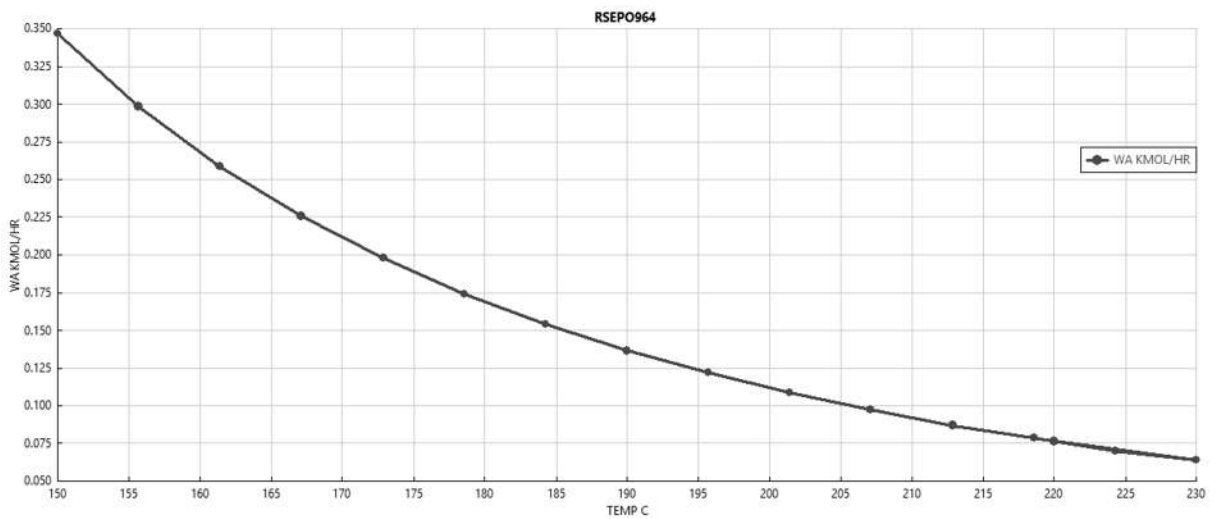
**Figura 5.50. Análisis de sensibilidad temperatura RSEPO9010.**



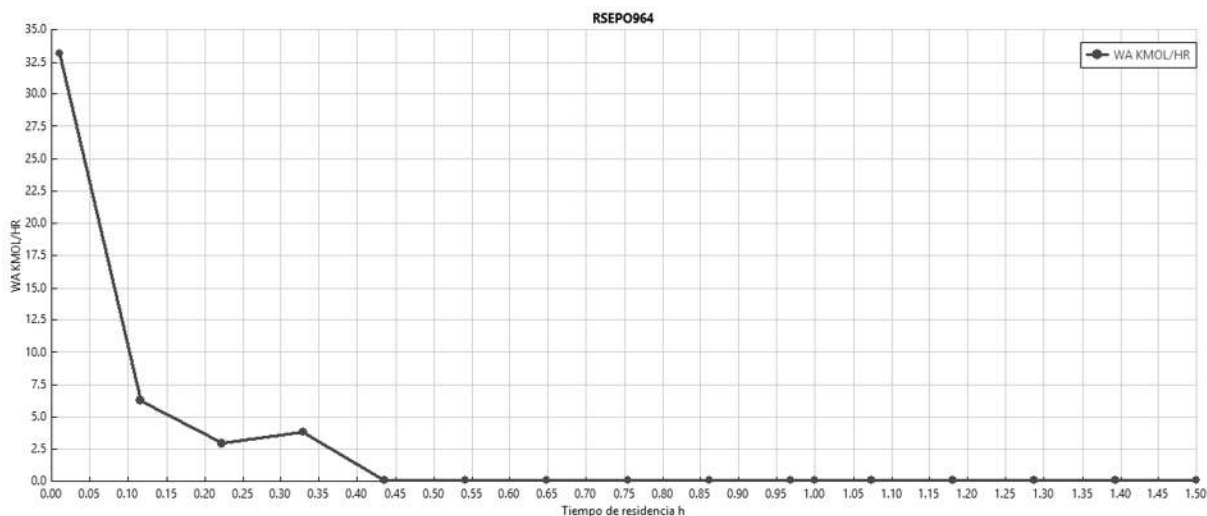
**Figura 5.51. Análisis de sensibilidad tiempo de residencia RSEPO9010.**



**Figura 5.52. Análisis de sensibilidad flujo de entrada óxido de propileno RSEPO964.**



**Figura 5.53. Análisis de sensibilidad temperatura RSEPO964.**



**Figura 5.54. Análisis de sensibilidad tiempo de residencia RSEPO964.**

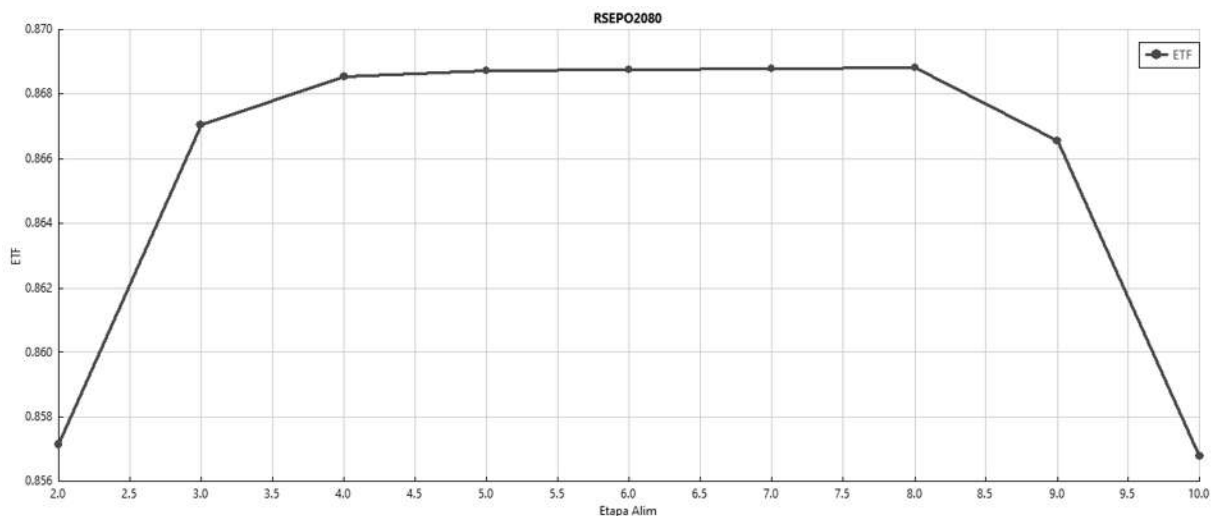
En la Tabla 5.7, se muestran los parámetros de proceso finales para las torres de destilación, resultado del análisis de sensibilidad.

**Tabla 5.7. Valores finales para los reactores en distintas configuraciones.**

	RSEPO2080	RSEPO9010	RSEPO964
<b>Volumen de reactor (m3)</b>	339.06	16.44	16.69
<b>Temperatura del reactor (°C)</b>	220	220	220
<b>Entrada de PO (kmol/h)</b>	38.05	177.53	188.64
<b>Presión del reactor (atm)</b>	10	5.8	3.7
<b>Servicio reactor</b>	Vapor alta presión	Generación de vapor de media presión	Generación de vapor de media presión

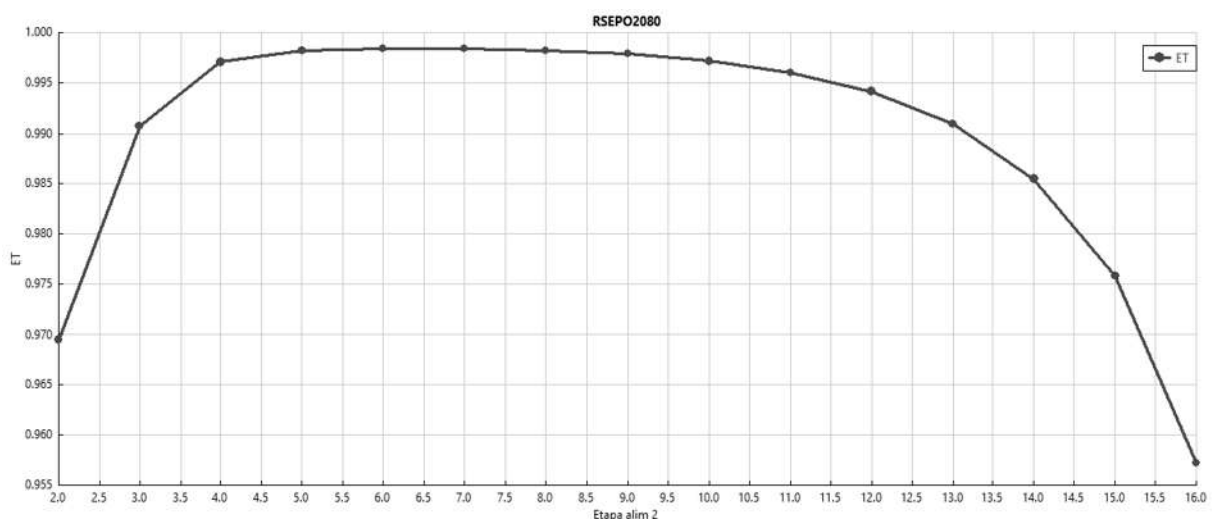
### **5.2.6 Diseño de la torre de destilación en el sistema óxido de propileno/propilenglicol.**

De la Figura 5.55 a la 5.66, se muestran los análisis de sensibilidad de los parámetros señalados en la metodología para el sistema de separación compuesto por dos torres representadas como torre 1 y torre 2.

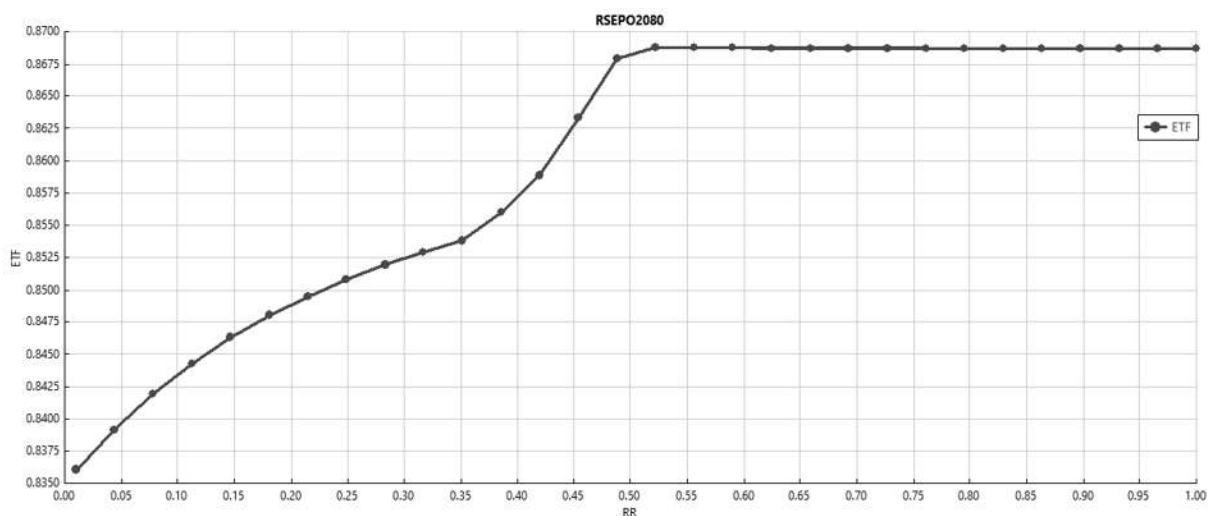


**Figura 5.55. Análisis de sensibilidad etapa de alimentación torre 1 RSEPO2080.**

En la Figura 5.55, se observa la influencia de la etapa de alimentación en la pureza del etanol a la salida del domo de la columna de destilación 1. En esta Figura se muestra que los valores de la pureza son por debajo del etanol anhidro debido a que es una mezcla de etanol con óxido de propileno. Además, se analiza que las etapas 5, 6, 7 y 8 tienen la concentración más elevada y similar entre ellas a la salida del domo, lo que podría proponer la eliminación de al menos 3 de las 4 etapas para la intensificación de la torre 1.

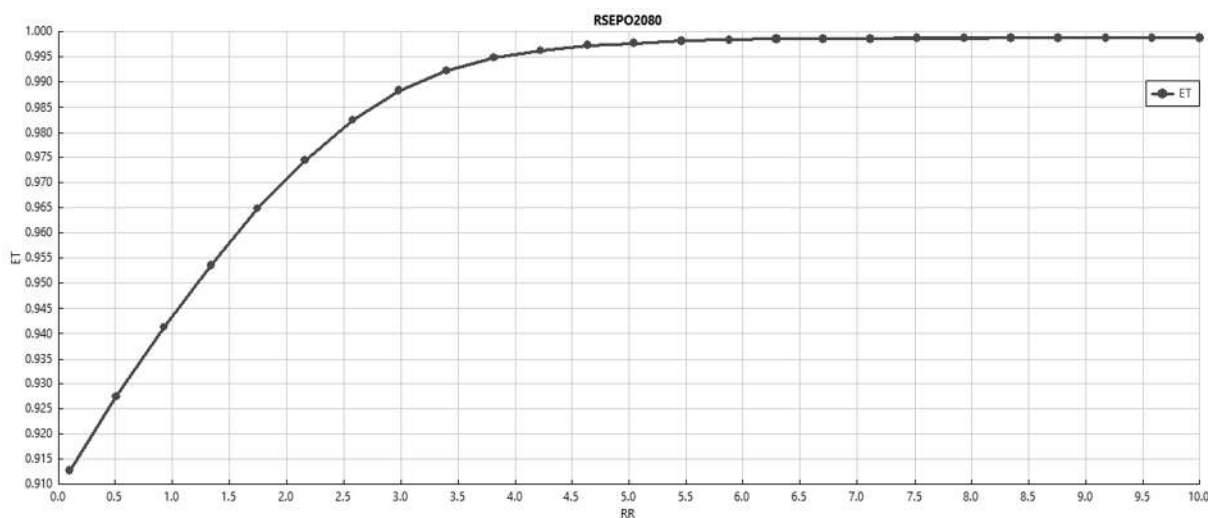


**Figura 5.56. Análisis de sensibilidad etapa de alimentación torre 2 RSEPO2080.**

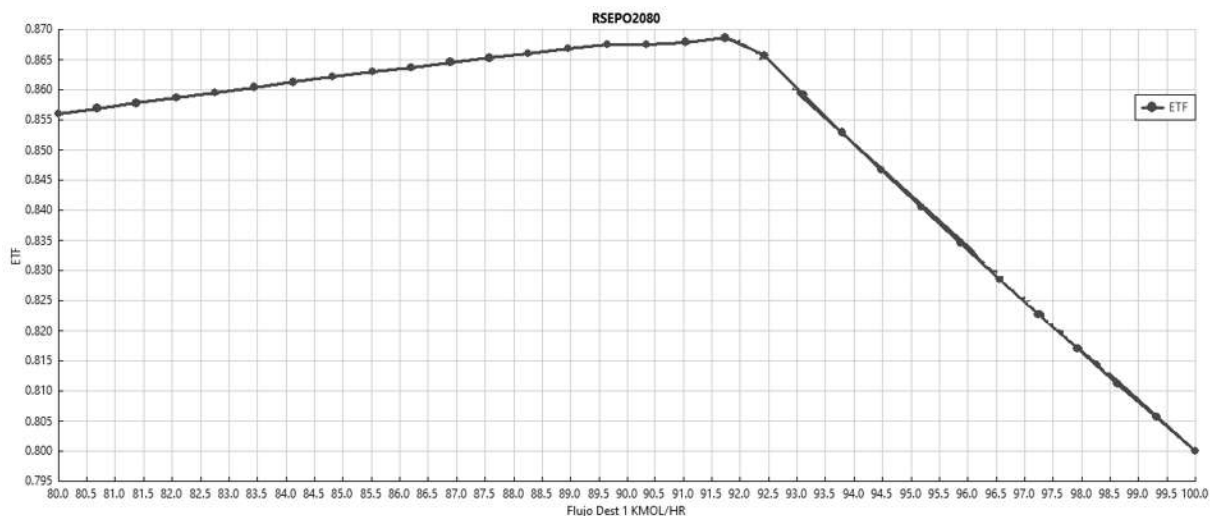


**Figura 5.57. Análisis de sensibilidad relación de reflujo torre 1 RSEPO2080.**

En la Figura 5.57, se observa la influencia de la relación de reflujo en la pureza del etanol a la salida del domo de la columna 1. El análisis muestra que aumentar la relación sobre 0.5 no tiene un gran efecto en el parámetro de interés. Sin embargo, entre mayor sea la relación de reflujo, mayor será el costo del equipo debido al tanque de reflujo; Así como, la carga energética empleada para la recirculación. Por lo tanto, se consideran relaciones alrededor de 0.5.

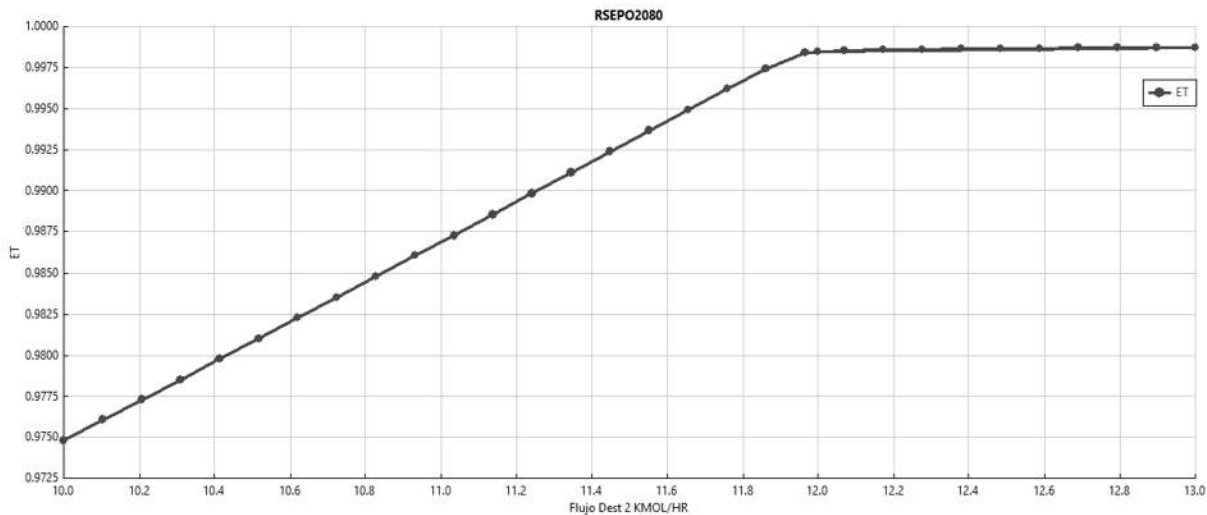


**Figura 5.58. Análisis de sensibilidad relación de reflujo torre 2 RSEPO2080.**



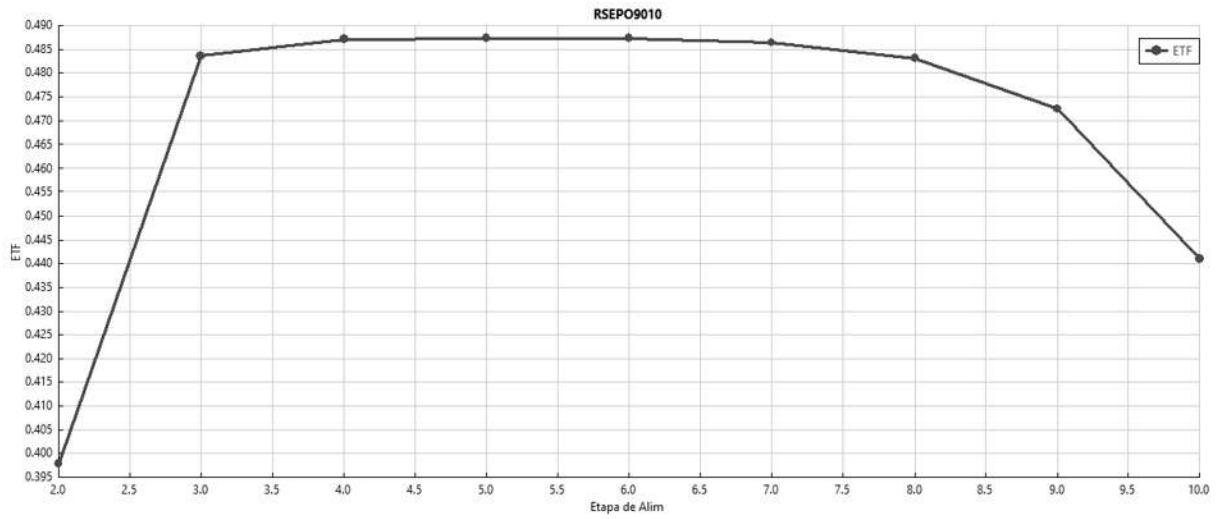
**Figura 5.59. Análisis de sensibilidad flujo de destilado torre 1 RSEPO2080.**

En la Figura 5.59, se observa la influencia del flujo de destilado en la pureza del etanol a la salida del domo de la columna de destilación 1. Se observa que la mejor opción se encuentra a una velocidad de 91 – 93 Kmol/h. Velocidades distintas afectan la pureza y recuperación del biocombustible.

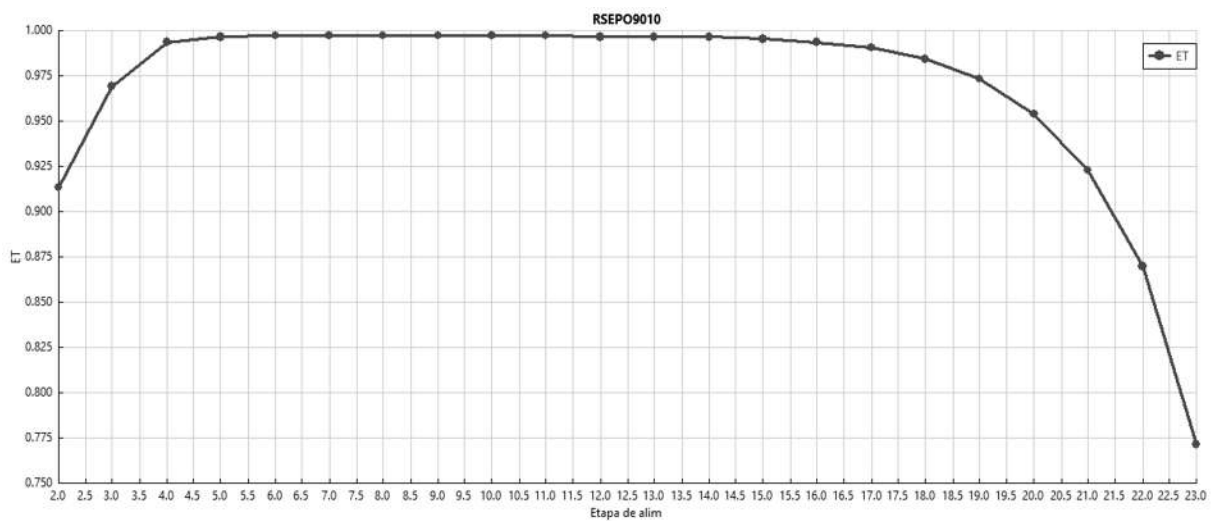


**Figura 5.60. Análisis de sensibilidad flujo de destilado torre 2 RSEPO2080.**

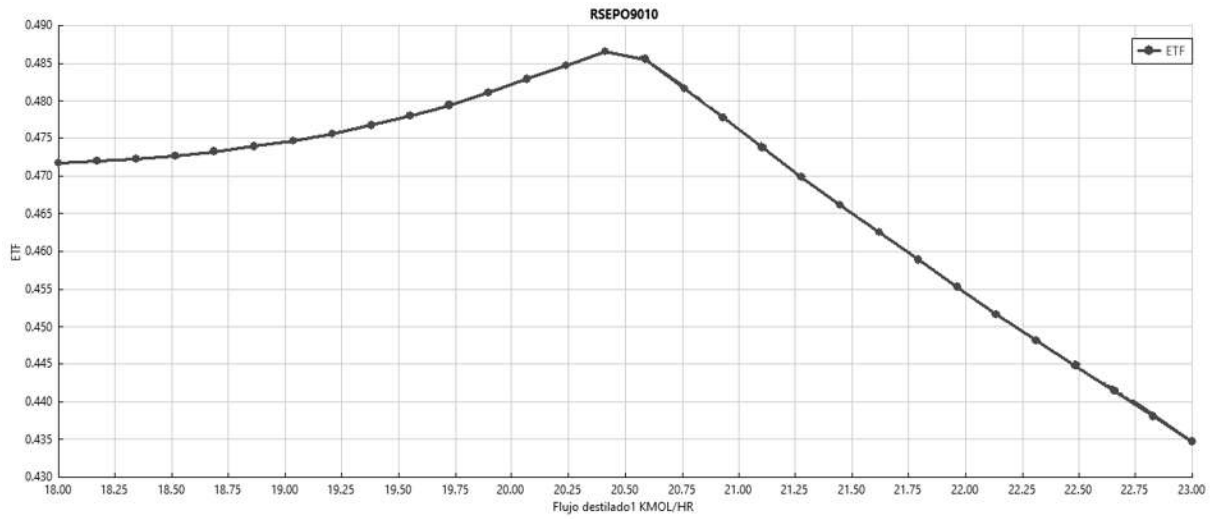




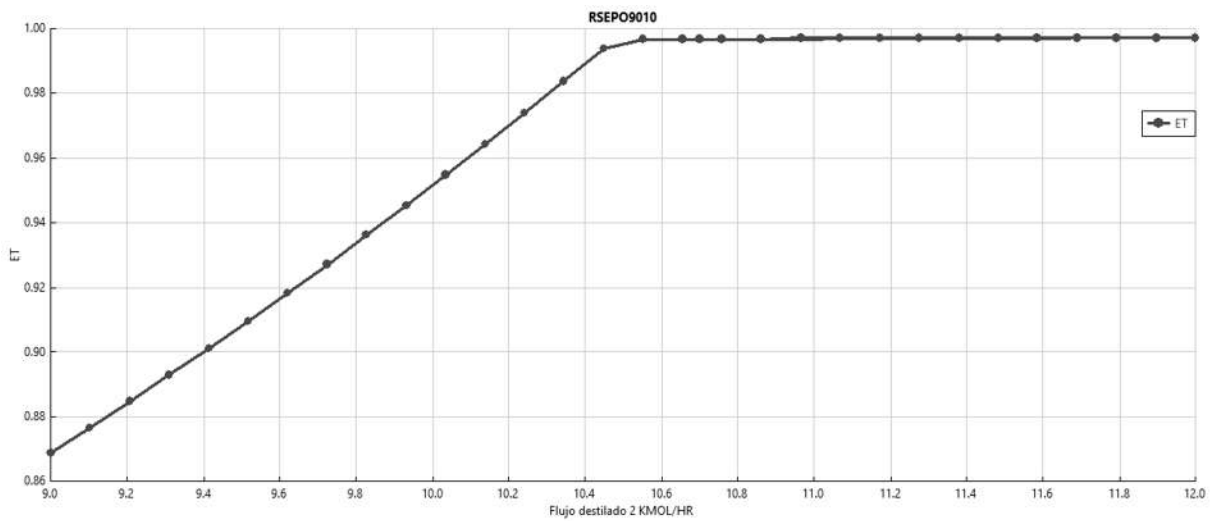
**Figura 5.61. Análisis de sensibilidad etapa de alimentación torre 1 RSEPO9010.**



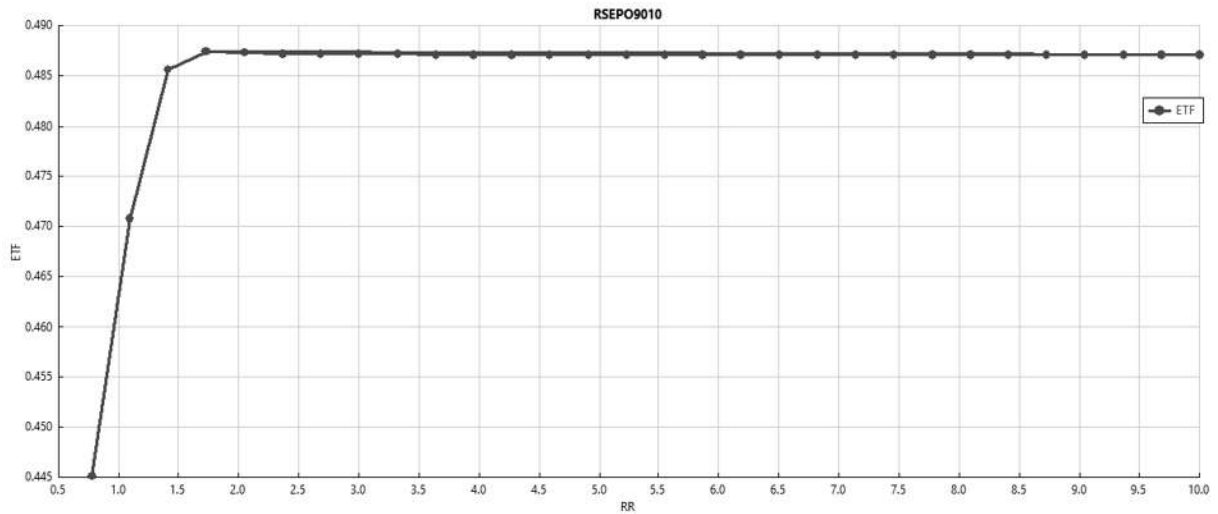
**Figura 5.62. Análisis de sensibilidad etapa de alimentación torre 2 RSEPO9010.**



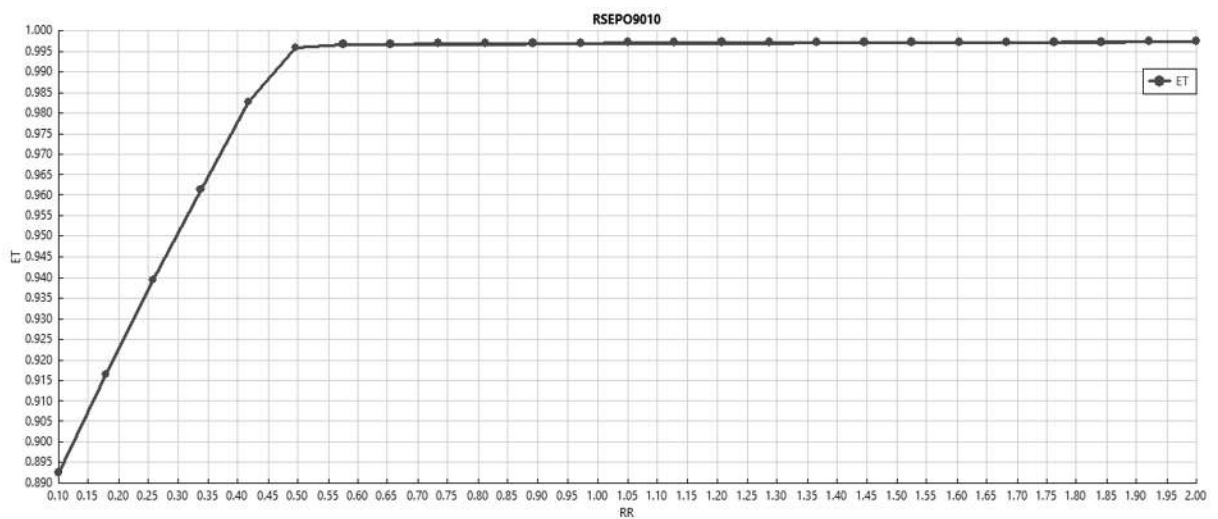
**Figura 5.63. Análisis de sensibilidad flujo de destilado torre 1 RSEPO9010.**



**Figura 5.64. Análisis de sensibilidad flujo de destilado torre 2 RSEPO9010**



**Figura 5.65. Análisis de sensibilidad relación de reflujo torre 1 RSEPO9010**



**Figura 5.66. Análisis de sensibilidad relación de reflujo torre 2 RSEPO9010**

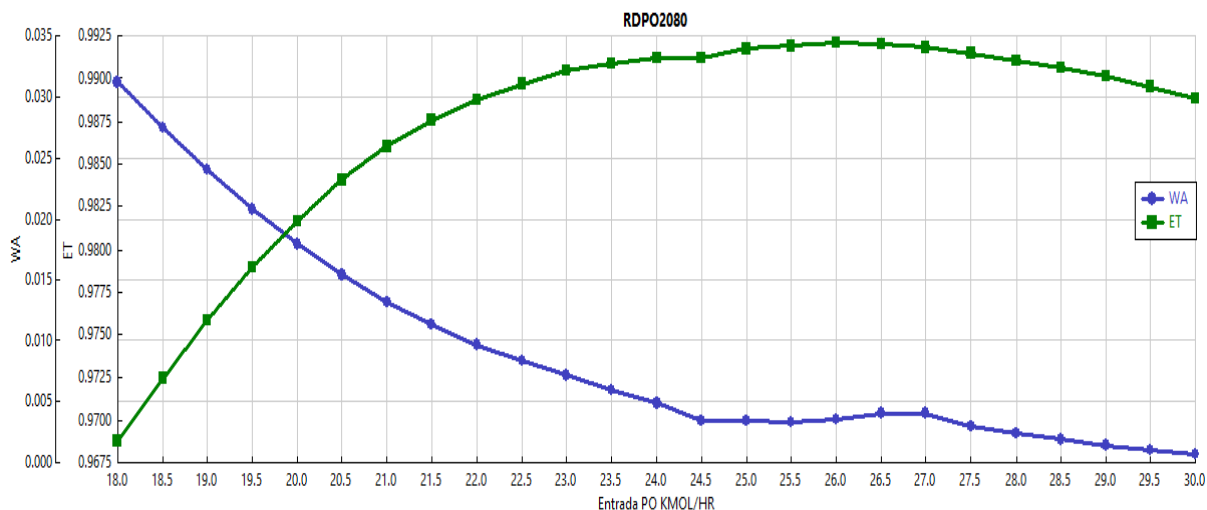
En la Tabla 5.8, se muestran los parámetros de proceso finales para las torres de destilación, resultado del análisis de sensibilidad.

**Tabla 5. 8. Valores finales para las columnas de destilación a distintas configuraciones**

	<b>RSEPO2080</b>	<b>RSEPO9010</b>	<b>RSEPO964</b>
<b>Numero de platos columna 1</b>	10	10	10
<b>Numero de platos columna 2</b>	16	23	23
<b>Plato de entrada columna 1</b>	6	6	7
<b>Plato de entrada columna 2</b>	7	12	12
<b>Flujo de destilado (kmol/h)torre1</b>	91.9	20.5	12.3
<b>Relación de reflujo torre1</b>	0.52	1.72	2.94
<b>Flujo de destilado (kmol/h)torre2</b>	12	10.7	8.28
<b>Relación de reflujo torre2</b>	6.3	0.65	0.42
<b>Entrada de PO (kmol/h)</b>	38.05	177.53	188.64
<b>Presión del torre 1(atm)</b>	1	1	1
<b>Presión del torre 2 (atm)</b>	1	1	1
<b>Servicio bomba</b>	Electricidad	Electricidad	Electricidad
<b>Servicio condensador torre1</b>	Aire	Aire	Aire
<b>Servicio ebullidor torre 1</b>	Vapor alta presión	Vapor de alta presión	Vapor de alta presión
<b>Servicio condensador torre2</b>	Agua	Agua	Agua
<b>Servicio ebullidor torre 2</b>	Vapor baja presión	Vapor de baja presión	Vapor de baja presión
<b>Servicio condensador PG</b>	Generación de vapor baja presión	Generación de vapor baja presión	Generación de vapor baja presión

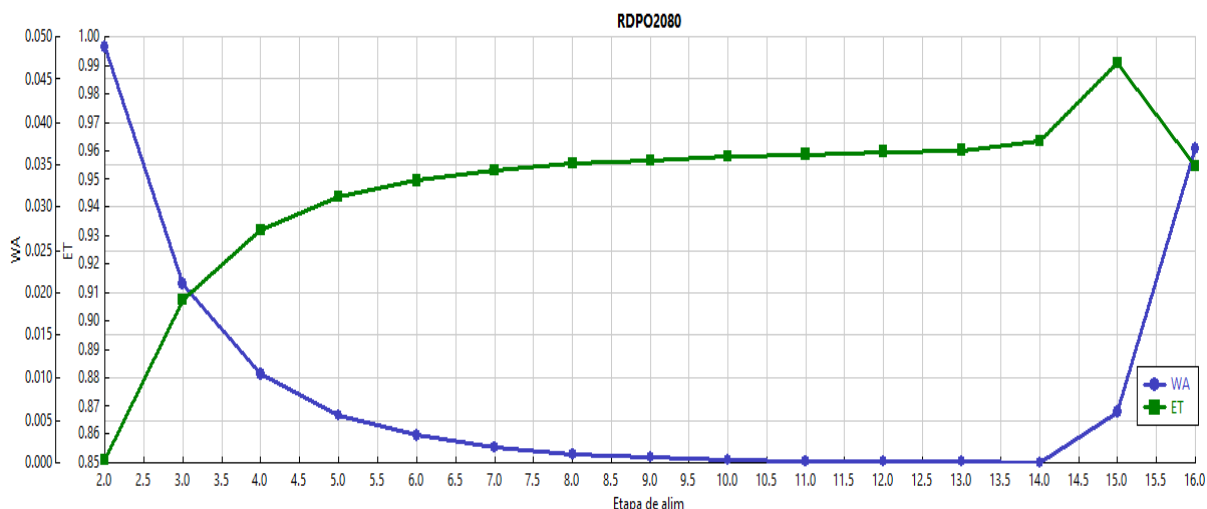
### **5.2.7 Diseño de la destilación reactiva en el sistema óxido de propileno/propilenglicol.**

De la Figura 5.67 a la 5.82, se muestran los análisis de sensibilidad de los parámetros señalados en la metodología.



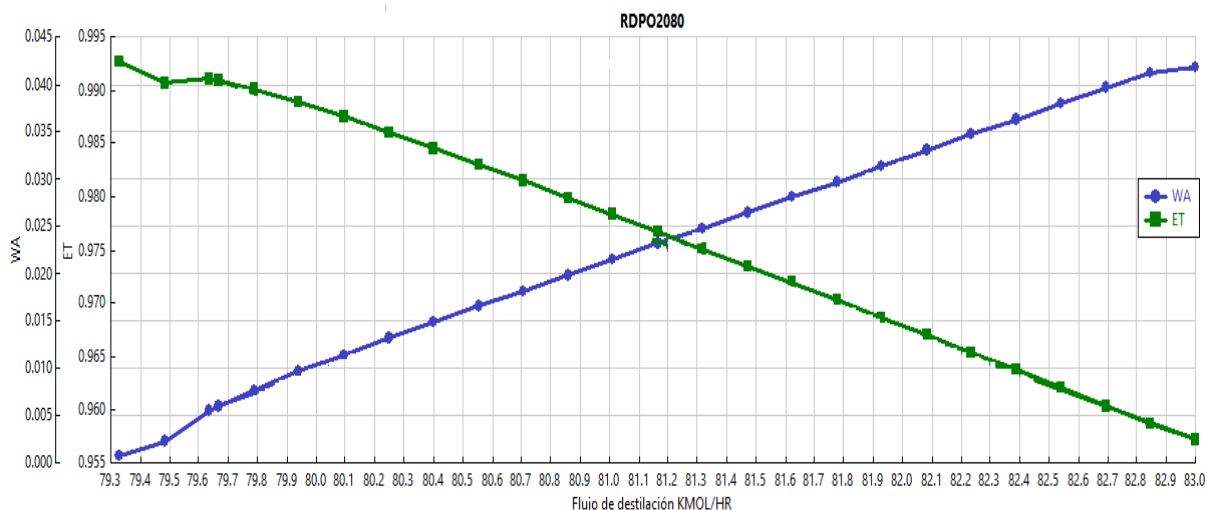
**Figura 5.67. Análisis de sensibilidad flujo de entrada óxido de propileno RDPO2080**

En la Figura 5.67, se observa como disminuye cantidad de agua, a la salida del domo de la torre de destilación reactiva, conforme aumenta el flujo de óxido de propileno hasta su agotamiento. Sin embargo, se debe tomar la mínima cantidad posible para eliminar el agua ya que un exceso de óxido de propileno genera una etapa adicional en el proceso de separación para su remoción del flujo de destilado y promueve una producción extra de dipropilenglicol debido a la reacción secundaria. La Figura 5.67 incluye el consumo de óxido de propileno en la transformación del propilenglicol a dipropilenglicol. El flujo de entrada para la operación a la concentración problema se encuentra entre 25 – 27 Kmol/h.



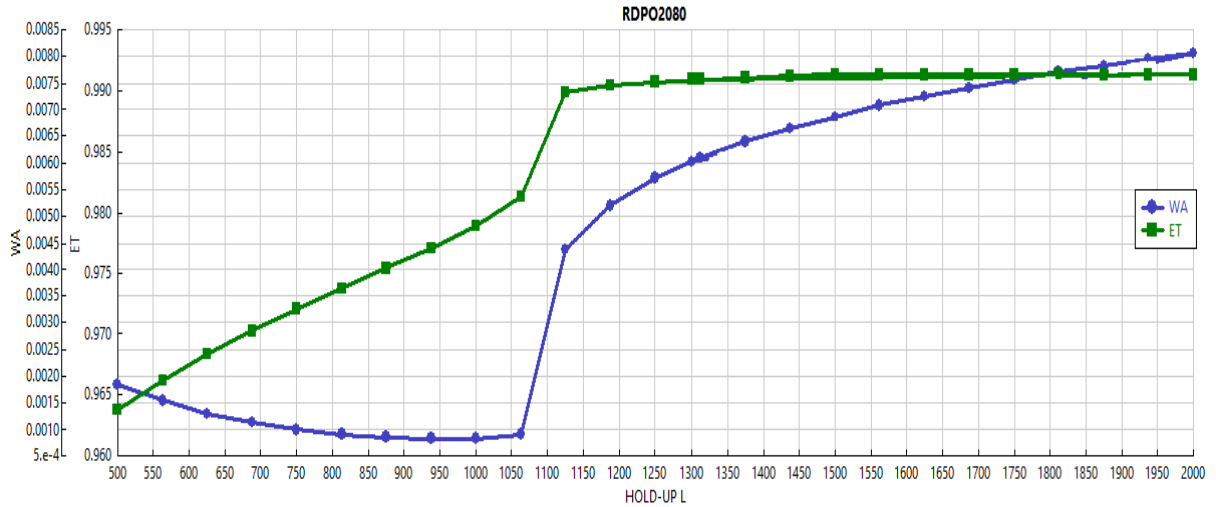
**Figura 5.68. Análisis de sensibilidad etapa de alimentación RDPO2080.**

En la Figura 5.68, se observa la influencia de la etapa de alimentación en la pureza del etanol anhidro a la salida del domo de la columna de destilación. Se observa que la mejor opción es la etapa 14 de la columna.



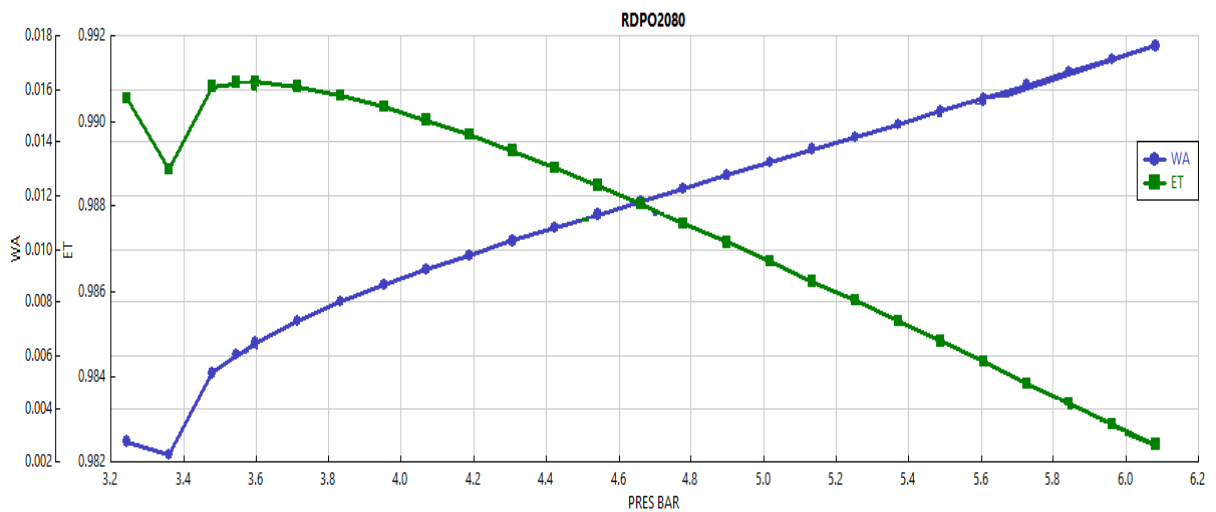
**Figura 5.69. Análisis de sensibilidad flujo de destilado RDPO2080.**

En la Figura 5.69, se observa la influencia del flujo de destilado en la pureza del etanol anhidro a la salida del domo de la columna de destilación. Se observa que la mejor opción se encuentra a una velocidad de 79 – 79.5 Kmol/h. Esto se debe a que a velocidades distintas se puede obtener menor pureza y recuperación del biocombustible.



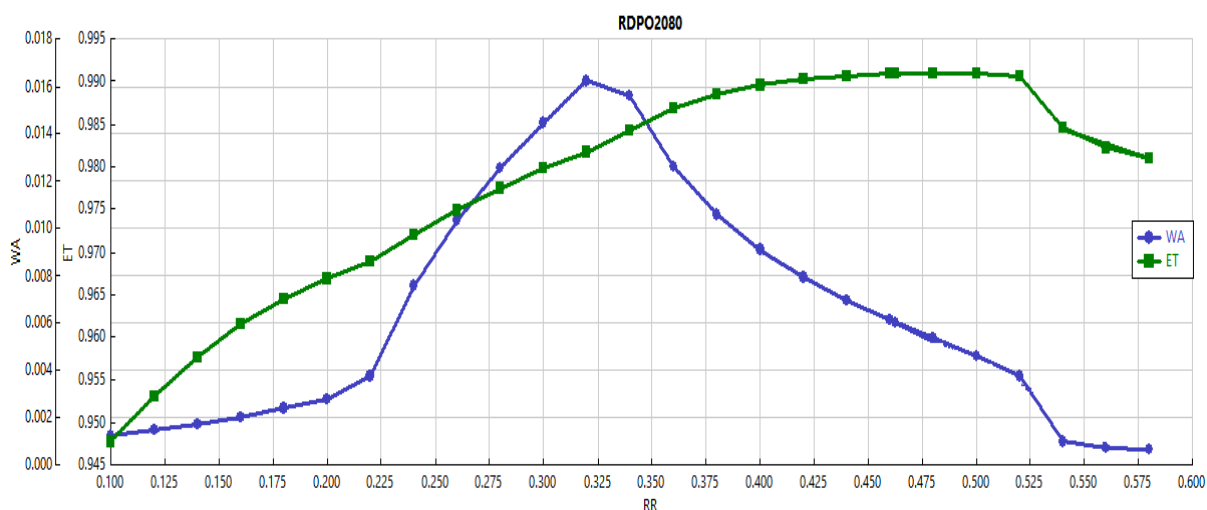
**Figura 5.70. Análisis de sensibilidad hold-up RDPO2080.**

En la Figura 5.70, se observa la influencia del hold up del líquido en la columna de destilación. Esta variable es muy importante debido a que influye de manera directa en la reacción proporcionando un tiempo de residencia dentro de la torre. La Figura 5.70 muestra que conforme aumenta el hold up, aumenta la pureza del etanol anhidro en el domo. Sin embargo, en valores de 1 100 a 2 000 litros por etapa evidencia que el aumento ya no es tan significativo a nivel pureza, pero si a nivel volumen el cual repercute de forma directa en el costo de capital. Por ende, se toman en cuenta valores alrededor de 1 100 l.



**Figura 5.71. Análisis de sensibilidad presión RDPO2080.**

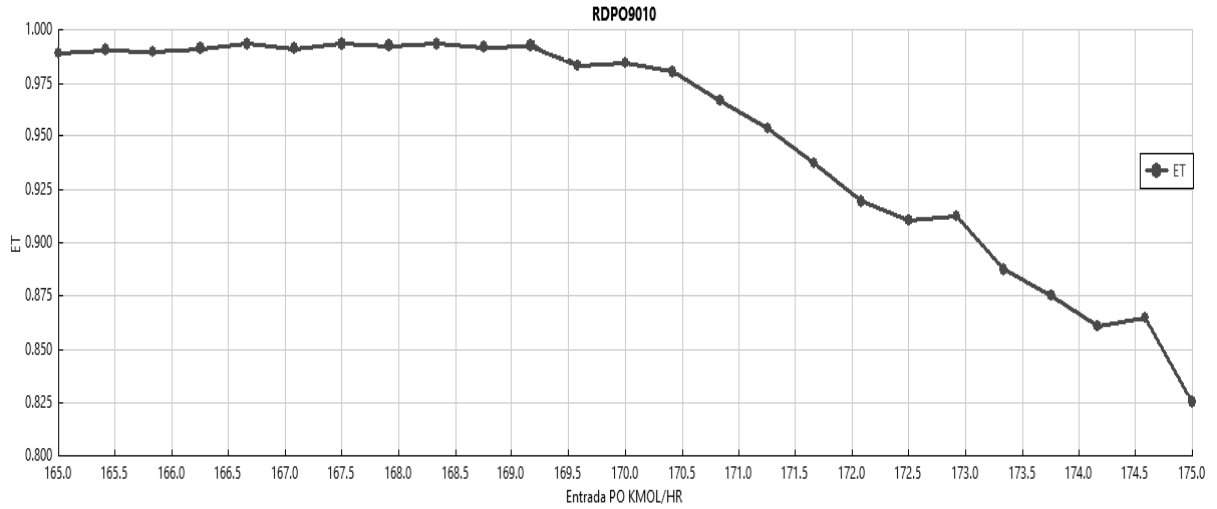
En la Figura 5.71, se observa la influencia de la presión en la cantidad de agua a la salida del domo de la columna. La tendencia la podemos atribuir a que a presiones mayores sin pasar la de vapor, los reactivos agua y óxido de propileno, se encuentran en fase vapor y aumentan su energía molecular lo cual favorece por su cinética de reacción. Por lo tanto, la presión de operación debe situarse alrededor de 3.2 - 4 atm. A esta dilución de etanol.



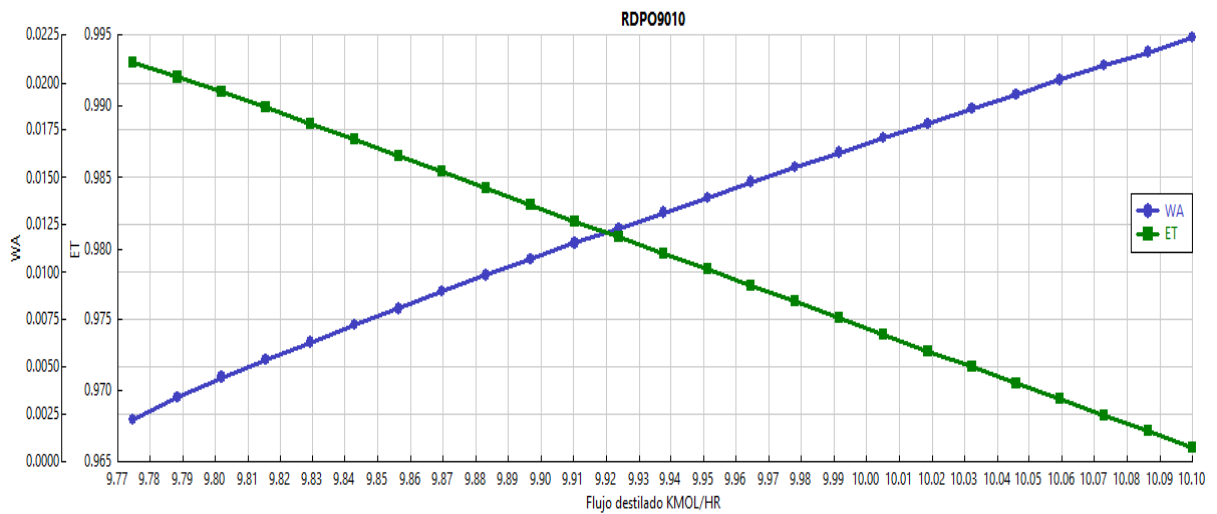
**Figura 5.72. Análisis de sensibilidad relación de reflujo RDPO2080.**

En la Figura 5.72, se observa la influencia de la relación de reflujo en la pureza del etanol anhidro. El análisis muestra que aumentar la relación tiene un gran efecto en el parámetro de interés. Sin embargo, entre mayor sea la relación de reflujo, mayor será el costo del equipo debido al tanque de reflujo; Así como, la carga energética empleada para la recirculación. Por lo tanto, se consideran relaciones entre 0.4 y 0.55.

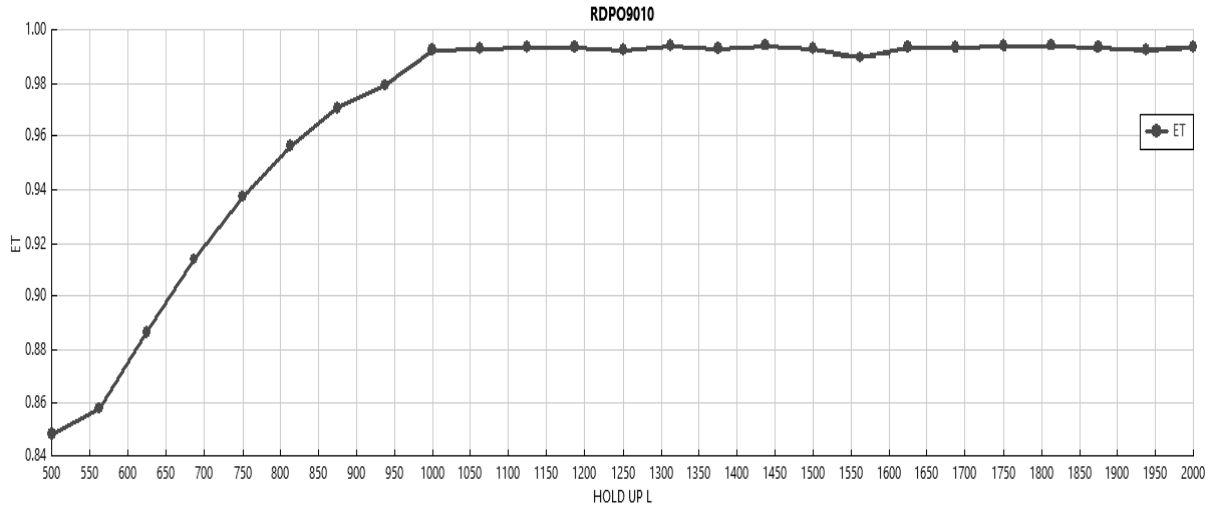




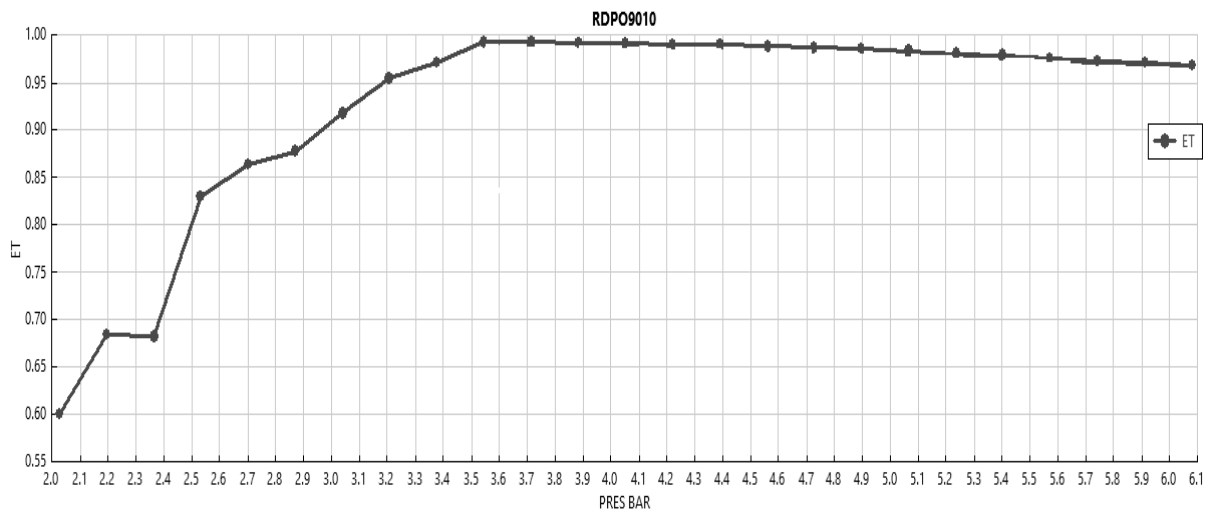
**Figura 5.73. Análisis de sensibilidad flujo de entrada óxido de propileno RDPO9010.**



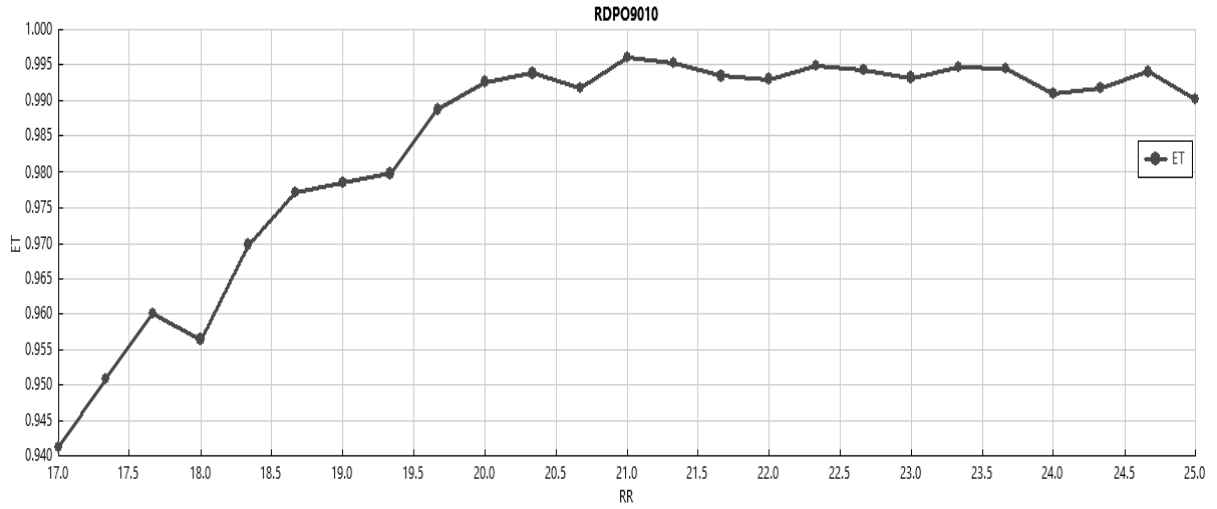
**Figura 5.74. Análisis de sensibilidad flujo de destilado RDPO9010.**



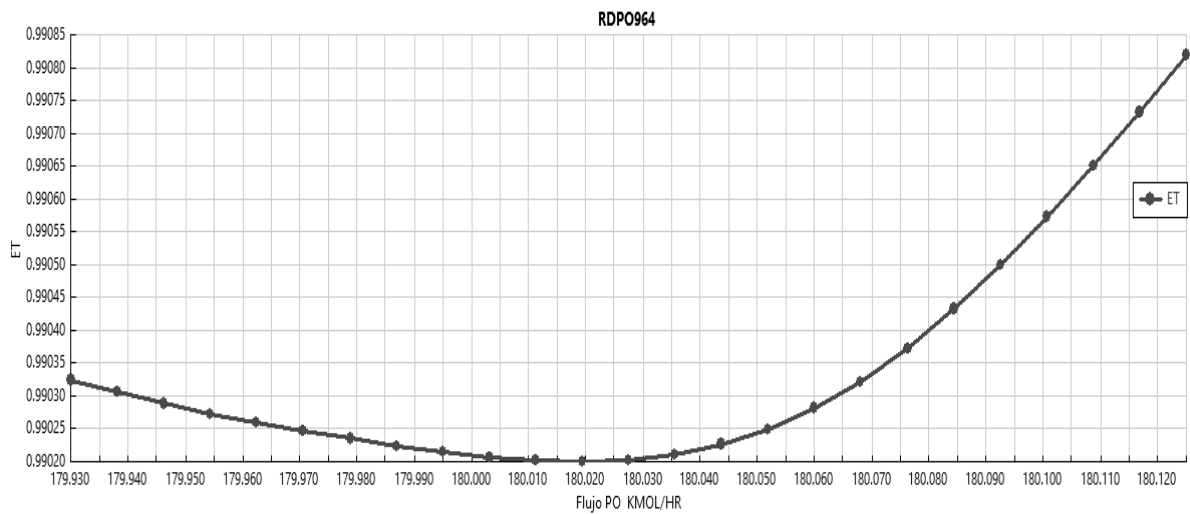
**Figura 5.75. Análisis de sensibilidad hold-up RDPO9010.**



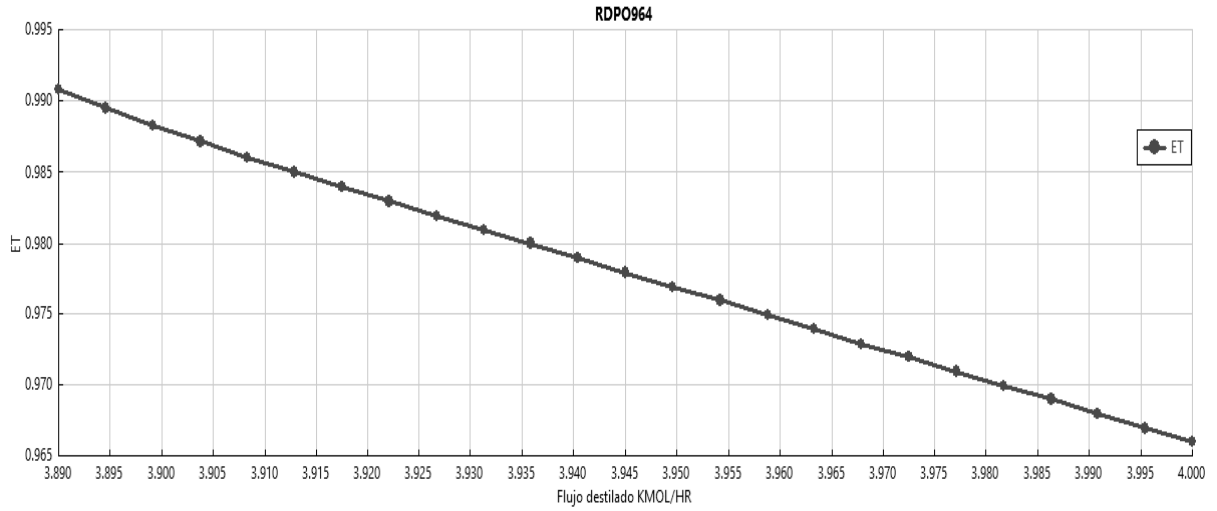
**Figura 5.76. Análisis de sensibilidad presión RDPO9010.**



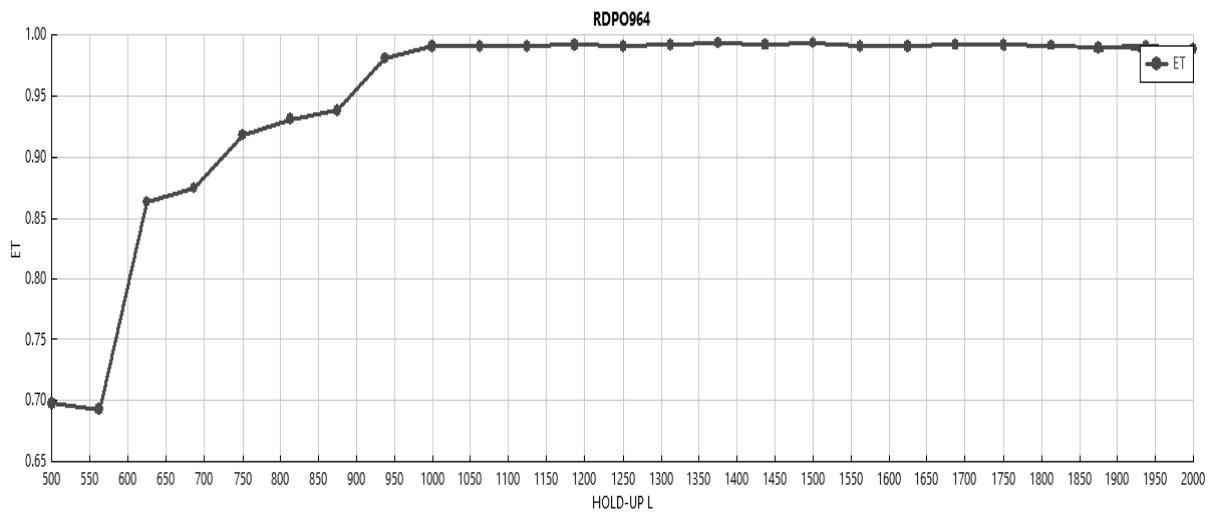
**Figura 5.77. Análisis de sensibilidad relación de reflujo RDPO9010.**



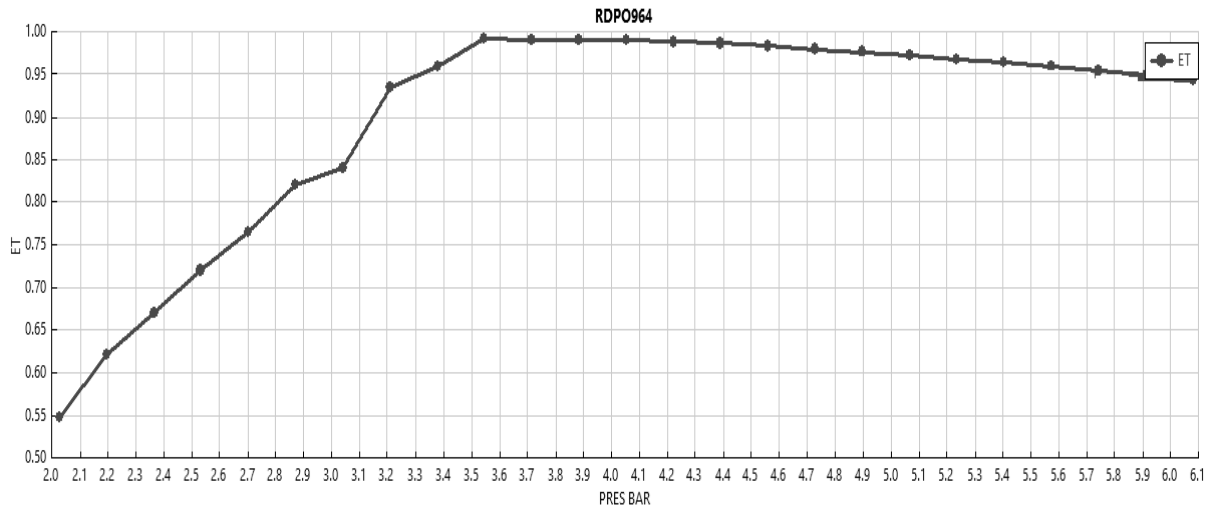
**Figura 5.78. Análisis de sensibilidad flujo de entrada óxido de propileno RDPO964.**



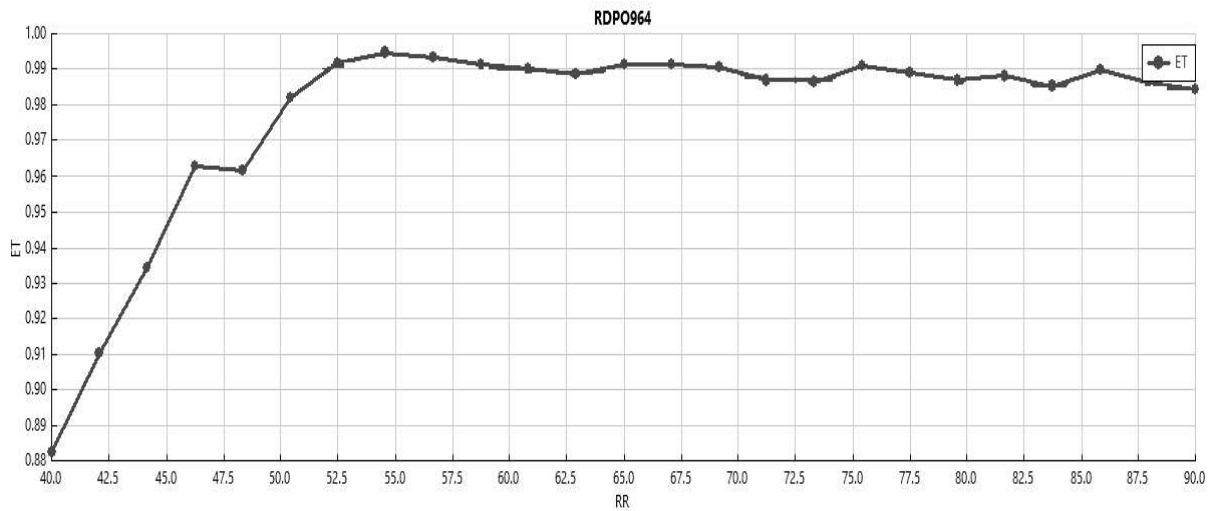
**Figura 5.79. Análisis de sensibilidad flujo de destilado RDPO964.**



**Figura 5.80. Análisis de sensibilidad hold-up RDPO964.**



**Figura 5.81. Análisis de sensibilidad presión RDPO964.**



**Figura 5.82. Análisis de sensibilidad relación de reflujo RDPO964.**

En la Tabla 5.9, se muestran los parámetros de proceso finales para las torres de destilación, resultado del análisis de sensibilidad.

**Tabla 5.9. Valores finales para los sistemas de destilación reactiva a distintas configuraciones**

	<b>RDPO2080</b>	<b>RDPO9010</b>	<b>RDPO964</b>
<b>Numero de platos columna1</b>	16	13	13
<b>Plato de entrada columna 1</b>	15	12	12
<b>Hold up (m3)</b>	1.3	1	1
<b>Platos reactivos</b>	2 a la 16	2 a la 13	2 a la 13
<b>Flujo de destilado (kmol/h)torre1</b>	79.67	9.775	3.89
<b>Relación de reflujo torre1</b>	0.4625	20	52
<b>Entrada de PO/EO (kmol/h)</b>	23.5	169.23	180.13
<b>Presión del torre 1(atm)</b>	3.5	3.5	3.5
<b>Servicio condensador torre 1</b>	Refrigerante 1	Refrigerante 1	Refrigerante 1
<b>Servicio ebullición torre 1</b>	Vapor alta presión	Fuego	Fuego
<b>Servicio condensador PG/EG</b>	Generación de vapor baja presión	Generación de vapor baja presión	Generación de vapor baja presión

La etapa 1 de la torre de destilación reactiva corresponde al condensador y la última al ebullición. Este se toma como un reactor, por ende, también es una etapa reactiva.

### **5.3 Simulación del sistema reactor-separación óxido de etileno/etilenglicol.**

En la Tabla 5.10, se muestran los datos obtenidos con los valores finales de las variables de proceso para las tres concentraciones.

**Tabla 5.10. Simulación de los sistemas convencionales con óxido de etileno.**

	<b>RSEEO2080</b>	<b>RSEEO9010</b>	<b>RSEEO964</b>
<b>Pureza de et %mol</b>	99.57	99.89	99.83
<b>Recuperación de et %mol</b>	99.57	99.60	98.59
<b>Carga térmica (KW)</b>			
<b>Reactor</b>	-40.1	-4592.7	-4853.71
<b>Ebullidor</b>	657.7	2277.5	4834.45
<b>Condensador</b>	-1655.77	-2073.85	-4680.70
<b>Condensador EG</b>	-122.98	-787.28	-838.77
<b>% Conversión EO</b>	99.42	100	100
<b>Temp salida et (°C)</b>	20	20	20
<b>Temp salida EG/PG (°C)</b>	135	135	135

#### **5.4 Simulación del sistema intensificado óxido de etileno/etilenglicol.**

En la Tabla 5.11, se muestran los datos obtenidos de los valores finales de las variables de proceso.

**Tabla 5.11. Simulación destilación reactiva con óxido de etileno.**

	<b>RDEO2080</b>	<b>RDEO9010</b>	<b>RDEO964</b>
<b>Pureza de et %mol</b>	99.1	99.27	99.03
<b>Recuperación de et %mol</b>	98.11	97.48	97.79
<b>Carga térmica (KW)</b>			
<b>Ebullidor</b>	786.43	205.93	906.54
<b>Condensador</b>	-1573.98	-3199.19	-4091.85
<b>Condensador EG</b>	-100.09	-923.35	-997.6
<b>% Conversión EO</b>	99.60	99.92	99.93
<b>Temp salida et (°C)</b>	20	20	20
<b>Temp salida EG/PG (°C)</b>	135	135	135

**5.5 Simulación del sistema reactor-separación óxido de propileno/propilenglicol.**

En la Tabla 5.12, se muestran los datos obtenidos de los valores finales de las variables de proceso.

**Tabla 5.12. Simulación de los sistemas convencionales con óxido de propileno.**

	RSEPO2080	RSEPO9010	RSEPO964
<b>Pureza de et %mol</b>	99.84	99.7	99.1
<b>Recuperación de et %mol</b>	99.72	97.7	99.6
<b>Carga térmica (KW)</b>			
<b>Reactor</b>	856.814	-2639.02	-2905.08
<b>Ebullidor 1</b>	156.03	425.15	457.09
<b>Condensador 1</b>	-1493	-543.24	-482.74
<b>Ebullidor 2</b>	679.3	145.63	102.53
<b>Condensador 2</b>	-665.46	-140.81	-89.84
<b>Condensador PG</b>	-176.18	-924.48	-1001.39
<b>% Conversión PO</b>	76.05	94.64	95.85
<b>Temp salida et (°C)</b>	78.27	78.3	78.28
<b>Temp salida PG (°C)</b>	135	135	135

**5.6 Simulación del sistema intensificado óxido de propileno/propilenglicol.**

En la Tabla 5.13, se muestran los datos obtenidos de los valores finales de las variables de proceso.



**Tabla 5.13. Simulación destilación reactiva con óxido de propileno.**

	<b>RDPO2080</b>	<b>RDPO9010</b>	<b>RDPO964</b>
<b>Pureza de etanol %mol</b>	99.09	99.3	99.14
<b>Recuperación de et %mol</b>	98.68	97.1	96.41
<b>Carga térmica (KW)</b>			
<b>Ebullidor</b>	1290.09	652.59	529.99
<b>Condensador</b>	-1590.76	-2074.94	-2834.14
<b>Condensador PG</b>	-130.87	-1313.31	-1400.17
<b>% Conversión PO</b>	99.98	99.87	99.88
<b>Temp salida et (°C)</b>	20	20	20
<b>Temp salida EG/PG (°C)</b>	135	135	135

### **5.7 Comparación y evaluación.**

La comparación mostrada a continuación consiste en los costos, venta y ganancia de cada sistema, pero a distintas concentraciones de la mezcla etanol agua.

#### **5.7.1 Comparación**

En las Tablas 5.14 a 5.17, se muestran los resultados de los estudios económicos de cada configuración.

**Tabla 5.14. Resultados económicos destilación reactiva óxido de etileno.**

	<b>RDEO2080</b>	<b>RDEO9010</b>	<b>RDEO964</b>
<b>Costo de servicio ebullidor (USD/h)</b>	\$ 9.91	\$ 3.15	\$ 13.87
<b>Costo de servicio condensador (USD/h)</b>	\$ 15.52	\$ 31.55	\$ 40.37
<b>Costo de servicio condensador EG (USD/h)</b>	-\$ 0.68	-\$ 6.28	-\$ 6.79
<b>Costo total de servicios (USD/h)</b>	\$ 24.75	\$ 28.42	\$ 47.45
<b>Costo de capital (USD)</b>	\$ 3,098,890	\$ 3,259,560	\$ 3,298,800
<b>Costo de operación (USD/año)</b>	\$41,632,500	\$109,684,000	\$116,401,000
<b>Venta producto (USD/año)</b>	\$42,222,300	\$112,965,510	\$119,024,041
<b>Ganancia (USD/año)</b>	\$ 589,800	\$ 3,281,510	\$ 2,623,041

**Tabla 5.15. Resultados económicos proceso convencional óxido de etileno.**

	<b>RSEEO2080</b>	<b>RSEEO9010</b>	<b>RSEEO964</b>
<b>Costo de servicio reactor (USD/h)</b>	\$ 0.36	-\$ 36.21	-\$ 38.27
<b>Costo de servicio ebullición (USD/h)</b>	\$ 5.92	\$ 28.70	\$ 60.94
<b>Costo de servicio condensador (USD/h)</b>	\$ 16.33	\$ 20.46	\$ 46.17
<b>Costo de servicio condensador EG (USD/h)</b>	-\$ 0.84	-\$ 5.36	-\$ 5.71
<b>Costo total de servicios (USD/h)</b>	\$ 21.77	\$ 7.58	\$ 63.13
<b>Costo de capital (USD)</b>	\$ 4,395,920	\$ 6,174,250	\$ 7,030,440
<b>Costo de operación (USD/año)</b>	\$41,916,800	\$110,308,000	\$117,573,000
<b>Venta producto (USD/año)</b>	\$42,261,900	\$112,921,000	\$119,024,958
<b>Ganancia (USD/año)</b>	\$ 345,100	\$ 2,613,000	\$ 1,451,958

**Tabla 5.16. Resultados económicos proceso convencional óxido de propileno.**

	<b>RSEPO2080</b>	<b>RSEPO9010</b>	<b>RSEPO964</b>
<b>Costo de servicio reactor (USD/h)</b>	\$ 7.71	-\$ 20.8	-\$ 22.9
<b>Costo de servicio bomba (USD/h)</b>	\$ 0.06	\$ 0.03	\$ 0.01
<b>Costo de servicio ebullición 1 (USD/h)</b>	\$ 1.40	\$ 3.83	\$ 4.11
<b>Costo de servicio condensador 1 (USD/h)</b>	\$ 0	\$ 0	\$ 0
<b>Costo de servicio ebullición 2(USD/h)</b>	\$ 4.65	\$ 1.00	\$ 0.70
<b>Costo de servicio condensador 2 (USD/h)</b>	\$ 0.51	\$ 0.11	\$ 0.07
<b>Costo de servicio condensador PG (USD/h)</b>	-\$ 1.20	-\$ 6.27	-\$ 6.81
<b>Costo total de servicios (USD/h)</b>	\$ 13.13	-\$ 22.11	-\$ 24.82
<b>Costo de capital (USD)</b>	\$ 8,463,850	\$ 6,424,500	\$ 6,444,970
<b>Costo de operación (USD/año)</b>	\$46,460,400	\$133,168,500	\$139,294,000
<b>Venta producto (USD/año)</b>	\$50,466,500	\$149,500,734	\$157,259,493
<b>Ganancia (USD/año)</b>	\$ 4,006,100	\$ 16,332,234	\$ 17,965,493

**Tabla 5.17. Resultados económicos destilación reactiva óxido de propileno.**

	<b>RDPO2080</b>	<b>RDPO9010</b>	<b>RDPO964</b>
<b>Costo de servicio ebullidor 1 (USD/h)</b>	\$ 11.61	\$ 9.98	\$ 8.11
<b>Costo de servicio condensador 1 (USD/h)</b>	\$ 15.69	\$ 27.79	\$ 27.96
<b>Costo de servicio condensador PG (USD/h)</b>	-\$ 0.89	-\$ 8.94	-\$ 9.53
<b>Costo total de servicios (USD/h)</b>	\$ 26.41	\$ 28.83	\$ 26.54
<b>Costo de capital (USD)</b>	\$ 3,466,980	\$ 3,200,610	\$ 3,200,730
<b>Costo de operación (USD/año)</b>	\$34,906,300	\$125,229,000	\$132,672,000
<b>Venta producto (USD/año)</b>	\$39,110,100	\$143,351,985	\$151,117,233
<b>Ganancia (USD/año)</b>	\$ 4,203,800	\$ 18,122,985	\$ 18,445,233

Para hacer una comparación entre todos los procesos se consideran las siguientes categorías:

- Porcentaje de pureza.
- Porcentaje de recuperación de etanol.
- Emisiones de CO<sub>2</sub> por servicios.
- Costo total de servicios.
- Costo capital.
- Costo de operación.
- Ganancia.

El análisis se muestra de la Tabla 5.18 a la 5.25.

**Tabla 5.18. Pureza de etanol. Porcentaje mol.**

	Pureza %mol
<b>RSEEO9010</b>	99.89
<b>RSEPO2080</b>	99.84
<b>RSEEO964</b>	99.83
<b>RSEPO9010</b>	99.70
<b>RSEEO2080</b>	99.57
<b>RDPO9010</b>	99.30
<b>RDEO9010</b>	99.27
<b>RDPO964</b>	99.14
<b>RSEPO964</b>	99.10
<b>RDEO2080</b>	99.1
<b>RDPO2080</b>	99.09
<b>RDEO964</b>	99.03

**Tabla 5.19. Recuperación de etanol. Porcentaje mol.**

	Recuperación %mol
<b>RSEPO2080</b>	99.72
<b>RSEEO9010</b>	99.60
<b>RSEPO964</b>	99.60
<b>RSEEO2080</b>	99.33
<b>RDPO2080</b>	98.68
<b>RSEEO964</b>	98.59
<b>RDEO2080</b>	98.11
<b>RDEO964</b>	97.79
<b>RSEPO9010</b>	97.70
<b>RDEO9010</b>	97.48
<b>RDPO9010</b>	97.10
<b>RDPO964</b>	96.41

*Tabla 5.20. Emisión de CO<sub>2</sub> por servicios.*

	Emisión de CO <sub>2</sub> (Kg/h)
<b>RDEO964</b>	801.89
<b>RSEEO964</b>	739.14
<b>RDPO2080</b>	594.47
<b>RDEO2080</b>	479.16
<b>RDEO9010</b>	473.87
<b>RSEEO2080</b>	459.72
<b>RDPO9010</b>	410.43
<b>RDPO964</b>	364.26
<b>RSEPO2080</b>	359.09
<b>RSEEO9010</b>	-317.12
<b>RSEPO9010</b>	-707.58
<b>RSEPO964</b>	-792.18

*Tabla 5.21. Costo total de servicios.*

	USD/h
<b>RSEEO964</b>	\$ 63.13
<b>RDEO964</b>	\$ 47.45
<b>RDPO9010</b>	\$ 28.83
<b>RDEO9010</b>	\$ 28.42
<b>RDPO964</b>	\$ 26.54
<b>RDPO2080</b>	\$ 26.41
<b>RDEO2080</b>	\$ 24.75
<b>RSEEO2080</b>	\$ 21.77
<b>RSEPO2080</b>	\$ 13.13
<b>RSEEO9010</b>	\$ 7.58
<b>RSEPO9010</b>	-\$ 22.11
<b>RSEPO964</b>	-\$ 24.82

**Tabla 5.22. Costo de capital.**

	<b>USD</b>
<b>RSEPO2080</b>	\$ 8,463,850
<b>RSEEO964</b>	\$ 7,030,440
<b>RSEPO964</b>	\$ 6,444,970
<b>RSEPO9010</b>	\$ 6,424,500
<b>RSEEO9010</b>	\$ 6,174,250
<b>RSEEO2080</b>	\$ 4,395,920
<b>RDPO2080</b>	\$ 3,466,980
<b>RDEO964</b>	\$ 3,298,800
<b>RDEO9010</b>	\$ 3,259,560
<b>RDPO964</b>	\$ 3,200,730
<b>RDPO9010</b>	\$ 3,200,610
<b>RDEO2080</b>	\$ 3,098,890

**Tabla 5.23. Costo de operación.**

	<b>USD/año</b>
<b>RSEPO964</b>	\$ 139,294,000
<b>RSEPO9010</b>	\$ 133,168,500
<b>RDPO964</b>	\$ 132,672,000
<b>RDPO9010</b>	\$ 125,229,000
<b>RSEEO964</b>	\$ 117,573,000
<b>RDEO964</b>	\$ 116,401,000
<b>RSEEO9010</b>	\$ 110,308,000
<b>RDEO9010</b>	\$ 109,684,000
<b>RSEPO2080</b>	\$ 46,460,400
<b>RSEEO2080</b>	\$ 41,916,800
<b>RDEO2080</b>	\$ 41,632,500
<b>RDPO2080</b>	\$ 34,906,300



**Tabla 5.24. Venta producto.**

	<b>USD/año</b>
<b>RSEPO964</b>	\$ 157,259,493
<b>RSEPO9010</b>	\$ 149,500,734
<b>RDPO964</b>	\$ 151,117,233
<b>RDPO9010</b>	\$ 143,351,985
<b>RSEEO964</b>	\$ 119,024,958
<b>RDEO964</b>	\$ 119,024,041
<b>RSEEO9010</b>	\$ 112,921,000
<b>RDEO9010</b>	\$ 112,965,510
<b>RSEPO2080</b>	\$ 50,466,500
<b>RSEEO2080</b>	\$ 42,261,900
<b>RDEO2080</b>	\$ 42,222,300
<b>RDPO2080</b>	\$ 39,110,100

**Tabla 5.25. Ganancia.**

	<b>USD/año</b>
<b>RDPO964</b>	\$ 18,445,233
<b>RDPO9010</b>	\$ 18,122,985
<b>RSEPO964</b>	\$ 17,965,493
<b>RSEPO9010</b>	\$ 16,332,234
<b>RDPO2080</b>	\$ 4,203,800
<b>RSEPO2080</b>	\$ 4,006,100
<b>RDEO9010</b>	\$ 3,281,510
<b>RDEO964</b>	\$ 2,623,041
<b>RSEEO9010</b>	\$ 2,613,000
<b>RSEEO964</b>	\$ 1,451,958
<b>RDEO2080</b>	\$ 589,800
<b>RSEEO2080</b>	\$ 345,100

### **5.7.2 Evaluación**

Se realiza una evaluación por categoría. Sin embargo, la que tiene mayor relevancia es la ganancia. Esta prioridad se da debido a que es la que le otorga valor al proceso y de forma directa toma en cuenta parámetros económicos como costos de operación y la venta de producto.

#### **5.7.2.1 Pureza**

La mayor pureza se obtiene de los procesos constituidos por los sistemas reactor – separación. Esto se debe a que, en los procesos de intensificación, las mejores condiciones de separación, no son las apropiadas para la reacción y viceversa.

La pureza se atribuye a que se maneja mejor las condiciones de reacción en el reactor que en la destilación reactiva.

#### **5.7.2.2 Recuperación de etanol**

La mayor recuperación se obtiene de los procesos constituidos por los sistemas reactor – separación. Esto se debe a que, en los procesos de intensificación, las mejores condiciones de separación, no son las apropiadas para la reacción y viceversa.

La pureza se atribuye a que se maneja mejor las condiciones de separación en la torre de destilación que en la destilación reactiva.

#### **5.7.2.3 Emisión CO<sub>2</sub>**

Las emisiones de CO<sub>2</sub> se encuentran en función del tipo, cantidad y número de servicios que utiliza cada proceso. Podemos observar que los procesos que menos CO<sub>2</sub> emiten son las configuraciones de reactor – separación. Esto se debe a la cantidad de vapor de media presión que genera el reactor.

En el caso de la configuración reactor – separación, donde nos salen valores negativos, significa que por la clase de servicios, es el CO<sub>2</sub> que se ahorra por la producción de vapor de baja y media presión en todo el sistema.

Además, el tipo de servicios que se utiliza en el ebullidor para las torres de destilación es vapor de alta presión a diferencia del aceite caliente y fuego que utiliza la

destilación reactiva. Esto tiene un impacto fuerte en las emisiones debido a que se utiliza alguna especie de combustible fósil para conseguir dichos servicios.

#### **5.7.2.4 Costo total de servicio**

Al igual que las emisiones de CO<sub>2</sub>, el costo total de servicio se encuentra en función del tipo, cantidad y número de servicios que utiliza cada proceso. Así mismo, se observa que es más económico la configuración de reactor - separación que las torres de destilación reactiva debido al aprovechamiento de la energía química liberada en el reactor.

Dentro de los procesos reactor – separación es más económico el uso de óxido de propileno. Esto se lo atribuimos a que con óxido de etileno se debe utilizar refrigerante en el condensador y en los de óxido de propileno se utiliza aire a temperatura ambiente y agua de refrigeración. El servicio de agua es más barato que el refrigerante y el aire relativamente no tiene costo.

#### **5.7.2.5 Costo capital**

Al observar todos los costos capitales, se aprecia que es mayor el de los sistemas reactor – separación porque son más equipos los que se requieren que el proceso intensificado. Dentro de los procesos, tenemos que mayor el costo capital para el óxido de propileno dentro de la configuración reactor – separación por la segunda columna de destilación que requiere. Aunque observando, tenemos la configuración RSEEO964 como el segundo proceso más caro, esto se debe a las dimensiones del tanque que se requiere para tener la relación de reflujo de 90.

Otro factor importante que es una variable para el costo capital es la dimensión de los equipos. El tiempo de residencia en el reactor está en función del volumen del mismo. Esto nos da tanques muy grandes que requieren un mayor capital para su construcción.

Otro factor indirecto que afecta este costo de capital es el espacio en planta. Al tener más equipos y con un volumen mayor se requiere una planta de mayor dimensión, lo cual representa un problema para el inversionista.

### **5.7.2.6 Costo de operación**

Para los costos de operación, Aspen Economic Analyzer toma en cuenta los aspectos señalados en la metodología.

En esta evaluación se observan tres factores que influyen marcadamente. Primero es el número de equipos empleados en el proceso, la dilución empleada y por último el reactivo empleado.

Por parte del número de equipos afecta el costo de mantenimiento y costo de mano de obra ya que requiere un mayor número de empleados y supervisión. Como consecuencia de esto vemos que son más caros los procesos reactor – separación que los de destilación reactiva.

Por parte de la dilución empleada, tenemos un mayor costo de operación para los procesos que emplean etanol diluido. Esto se debe a que entre más diluida esté la mezcla a tratar, más reactivo necesitamos. El costo de los insumos es parte de los costos de operación.

Por último, por parte del reactivo empleado, tenemos que los costos de operación son más elevados para óxido de etileno que para óxido de propileno. Esto se debe a que tiene un costo mayor el óxido de etileno como insumo.

### **5.7.2.7 Venta**

Al analizar las ventas de producto se tiene que, a concentraciones diluidas de etanol, como insumo, se tiene una mayor venta. Esto se atribuye a que se obtiene una mayor producción de glicoles lo cual aumenta la ganancia.

Otro factor que influye en las ventas es el tipo de glicol que se obtiene. Dado a que el propilenglicol tiene un mayor precio en el mercado que el etilenglicol.

### **5.7.2.8 Ganancia**

En esta categoría tenemos de inicio una incertidumbre basada en la fluctuación continua del precio global de los insumos que no se toma en cuenta en este trabajo. Sin embargo, se maneja el precio actual señalado en la metodología como un panorama general.

Como primer factor, que influye en la ganancia, tenemos el costo de los insumos y productos. Se observa que son más redituables los procesos basados en óxido de propileno que los de óxido de etileno. Esto se debe a que es más económica la materia prima y la manufactura tienen mayor valor monetario.

El segundo factor es la dilución que se utiliza. Entre mayor sea la dilución, es mayor la ganancia debido a la cantidad de glicol producido. Esto se explicó en la categoría de ventas.

Como tercer factor tenemos el tipo de proceso. Se tiene una mayor ganancia si es una destilación reactiva que una configuración reactor – separación. Este resultado se tiene debido a que una configuración reactor – separación tiene mayor costo de operación debido al mantenimiento de los equipos y mayor personal de operación que el proceso intensificado.

## CONCLUSIONES

Como conclusión podemos observar que es factible disminuir el número de operaciones unitarias del proceso global de la producción de etanol anhidro con un sistema reactivo. Esta reducción consiste en eliminar la columna de concentración y la columna de rectificación que nos llevan al punto azeotrópico. Una vez eliminadas estas operaciones tenemos que a la salida del fermentador puede pasar la mezcla etanol agua directo al proceso reactivo y esto resume una disminución del costo capital de la planta en general.

Basados en la evaluación realizada, se concluye que el mejor proceso para llevar a cabo la separación reactiva de la mezcla etanol - agua para la producción de etanol anhidro es la destilación reactiva con óxido de propileno en la condición más diluida. Esto se debe a que es el proceso con mayor utilidad por el aprovechamiento del agua para la generación del producto alterno, las emisiones de CO<sub>2</sub> de este proceso son bajas en comparación a la mayoría de los otros y el costo capital es de los más bajos.

Como opción alterna se propone el sistema convencional con óxido de propileno en la condición más diluida ya que la ganancia es ligeramente menor a la del proceso intensificado, pero evita emisiones de CO<sub>2</sub> por la generación de vapor de media y baja presión. Por tal motivo, se concluye que este es el proceso con mayor sustentabilidad. La desventaja es que el costo capital asciende al doble del costo de su similar intensificado.

Cabe destacar que para tomar el costo del etanol anhidro se tomó el precio del mismo a una pureza del 99.0%. Sin embargo, se recomienda generar una nueva valoración de este producto, en base a purzas mayores, y así analizar si económicamente puede ser mejor los procesos convencionales que los intensificados.

Por último, es importante señalar que los puntos de operación de los equipos no son óptimos, pero se debe trabajar para lograr óptimos locales y un óptimo global para toda la planta.

## REFERENCIAS

- Afdc.energy.gov. (2016). Alternative Fuels Data Center: Maps and Data. [online] Disponible en: <http://www.afdc.energy.gov/data/search?q=ethanol+production> [Acceso 13 Ene. 2015].
- Altiocka, Mehmet Riza, and Sema Akyalçin. 2009. "Kinetics of the Hydration of Ethylene Oxide in the Presence of Heterogeneous Catalyst." *Industrial and Engineering Chemistry Research* 48(24): 10840–44.
- An, Weizhong, Zixin Lin, Jun Chen, and Jianmin Zhu. 2014. "Simulation and Analysis of a Reactive Distillation Column for Removal of Water from Ethanol – Water Mixtures." *Industrial and Engineering Chemistry Research* 53: 6056–64.
- Breure, B., E. A J F Peters, and P. J A M Kerkhof. 2008. "Separation of Azeotropic Mixtures of Alcohols and Water with FricDiff." *Separation and Purification Technology* 62(2): 349–62.
- Delgado, J. A. et al. 2013. "Separation of Ethanol-Water Liquid Mixtures by Adsorption on a Polymeric Resin Sepabeads 207???" *Chemical Engineering Journal* 220: 89–97. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cej.2013.01.057>.
- Ferreira, Luciane S., and Jorge O. Trierweiler. 2009. "Modeling and Simulation of the Polymeric Nanocapsule Formation Process." *IFAC Proceedings Volumes (IFAC-PapersOnline)* 7(PART 1): 405–10.
- Hiroo, Momose, Kusumoto Koshi, Izumi Yusuke, and Mizutani Yukio. 1982. "Vapor-Phase Direct Hydration Tungstate of Ethylene Catalyst over Zirconium." *Journal of Catalysis* 31(2): 23–31. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021951782901968>.
- Kaewkannetra, P. et al. 2011. "Separation of Ethanol from Ethanol-Water Mixture and Fermented Sweet Sorghum Juice Using Pervaporation Membrane Reactor." *Desalination* 271(1–3): 88–91. <http://dx.doi.org/10.1016/j.desal.2010.12.012>.

- Kalyani, Swayampakula, Biduru Smitha, Sundergopal Sridhar, and Abburi Krishnaiah. 2008. "Pervaporation Separation of Ethanol-Water Mixtures through Sodium Alginate Membranes." *Desalination* 229(1–3): 68–81.
- Kiss, Anton A., and David J P C Suszwalak. 2012. "Enhanced Bioethanol Dehydration by Extractive and Azeotropic Distillation in Dividing-Wall Columns." *Separation and Purification Technology* 86: 70–78. <http://dx.doi.org/10.1016/j.seppur.2011.10.022>.
- Kozlovsky, I. A. et al. 2002. "Kinetics and Products Distribution of Selective Catalytic Hydration of Ethylene- and Propylene Oxides in Concentrated Aqueous Solutions." *Organic Process Research and Development* 6(5): 660–64.
- Momose, Hiroo, Koshi Kusumoto, Yusuke Izumi, and Yukio Mizutani. 1982. "Vapor-Phase Direct Hydration of Ethylene over Zirconium Tungstate Catalyst. I. Catalytic Behavior and Kinetics at Atmospheric Pressure." *Journal of Catalysis* 77(1): 23–31.
- Palomino, Alfredo, and Deyvi A Parientes. 2013. "Modelling Ethanol-Water Pressure Swing Distillation in an Structured Packed Bed Column." 16.
- Producto, D. (2016). *Productos Químicos, Productos Químicos de China catálogo de productos y directorio de proveedores de es.Made-in-China.com*. [online] Es.made-in-china.com. Disponible en: [http://es.made-in-china.com/category1\\_Chemicals/Chemicals\\_uissssssss.html](http://es.made-in-china.com/category1_Chemicals/Chemicals_uissssssss.html) [Acceso 1 Jul. 2016].
- Roosbehani, Behrooz, Saeedeh Imani Moqadam, Mojtaba Mirdrikvand, and Ali Cheshmeh Roshan. 2012. "Modeling Direct Ethylene Hydration over Zirconium Tungsten Catalyst: Fundamental of Ethanol Production Using the Biggest Global Ethylene Feeding Pipeline in Iran." *Energy and Environment Research* 2(2): p28. <http://www.ccsenet.org/journal/index.php/eer/article/view/17834>.
- Cardona, C A, and Francis Group. 2010. 2010 Focus on Catalysts Process Synthesis for Fuel Ethanol Production.



- Selvi, A. et al. 2007. "Basic Parameter Study for the Separation of a Isopropanol-Water Mixture by Using FricDiff Technology." *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* 46(9 SPEC. ISS.): 810–17.
- Shaikhutdinov, R. Z. et al. 2010. "Kinetics and Mechanism of the Catalytic Hydration of Propylene Oxide." *Kinetics and Catalysis* 51(1): 50–55.
- Singh, Neetu, and Ram Prasad. 2011a. "Experimental Studies on the Effect of Inert Gases on Diffusion Distillation of Ethanol-Water Mixtures." *Journal of Chemical Technology and Biotechnology* 86(12): 1495–1500.
- . 2011b. "Fuel Grade Ethanol by Diffusion Distillation: An Experimental Study." *Journal of Chemical Technology and Biotechnology* 86(5): 724–30.
- Svandov, Z, L Jelemensk, J Markos, and A Molnr. 2005. "Steady States Analysis and Dynamic Simulation as a Complement in the Hazop Study of Chemical Reactors." *Process Safety and Environmental Protection* 83(5): 463–71. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B8JGG-4RSJN60-B/2/59271ccbf228ad7367c6761baffe7c22>.
- Tavan, Yadollah, and Seyyed Hossein Hosseini. 2013. "A Novel Integrated Process to Break the Ethanol/water Azeotrope Using Reactive Distillation - Part I: Parametric Study." *Separation and Purification Technology* 118: 455–62. <http://dx.doi.org/10.1016/j.seppur.2013.07.036>.