



Universidad Nacional

SAN LUIS GONZAGA



Reconocimiento-NoComercial 4.0 Internacional

Esta licencia permite a otras distribuir, combinar, retocar, y crear a partir de su obra de forma no comercial y, a pesar que son nuevas obras deben siempre rendir crédito y ser no comerciales, no están obligadas a licenciar sus obras derivadas bajo los mismos términos.

<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0>



FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA Y PETROQUÍMICA

UNIVERSIDAD NACIONAL SAN LUIS GONZAGA

EVALUACIÓN DE ORIGINALIDAD

CONSTANCIA

El que subscribe, deja constancia que se ha realizado el análisis con el software de verificación de similitud al documento cuyo título es:

MODELADO Y SIMULACION DE LA DESTILACION EXTRACTIVA PARA LA PURIFICACION DEL METILCICLOHEXANO.

Presentado por:

JOSSELL JAYR BELSUZARRI ZARATE

Autor del Proyecto de Tesis del nivel de **PREGRADO** de la Facultad de **INGENIERÍA QUÍMICA Y PETROQUÍMICA**. El Resultado obtenido es 02% (PORCENTAJE DE SIMILITUD) por lo cual se otorga el calificativo de:

APROBADO, según Reglamento de Evaluación de la Originalidad.

Se adjunta al presente el reporte de evaluación con el software de verificación de originalidad.

Observaciones:

El porcentaje de similitud es menor del 20%, establecido como máximo por Reglamento de Evaluación de originalidad.

Ica, 25 de setiembre del 2023

Dra. ROSA LUZ GALINDO PASACHE
DIRECTOR DE LA UNIDAD DE INVESTIGACIÓN

**UNIVERSIDAD NACIONAL “SAN LUIS GONZAGA”
FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA Y PETROQUÍMICA**



***“Modelado y simulación de la destilación extractiva para la
purificación del metilciclohexano”***

**LINEA DE INVESTIGACIÓN:
Ciencias naturales, ingeniería y tecnologías sostenibles**

Tesis para optar el Título Profesional de Ingeniero Petroquímico

Presentado por:

Bach. BELSUZARRI ZARATE Jossell Jayr

Asesor:

Mag. Juan Alfredo Toledo Huaman

Ica, Perú

2023

DEDICATORIA

A Dios por guiarme con fortaleza y amor hasta el día de hoy.

A mis padres que me apoyaron y exigieron que siempre de lo mejor de mí para sobresalir en lo que me proponga en la vida, con sacrificio, trabajo y perseverancia.

A mi hija Issabella quien ha sido mi motivación más grande para poder darle un futuro mejor.

AGRADECIMIENTOS

En primer lugar, agradezco a mis padres que siempre me han brindado su apoyo incondicional para culminar mi carrera profesional.

A mi tutor, el Mag. Juan Alfredo Toledo Huaman, por su compromiso y dedicación, sin sus palabras y correcciones precisas no hubiese podido lograr llegar a esta instancia tan anhelada. Gracias por su guía y todos sus consejos, los llevaré grabados para siempre en la memoria de mi futuro profesional.

Finalmente, agradecer a la universidad que me ha exigido tanto, pero al mismo tiempo me ha permitido obtener mi tan ansiado título.

Índice de Contenidos

	Pág.
Dedicatoria	ii
Agradecimientos	ii
Índice de Contenidos	iii
Índice de Tablas	iv
Índice de Figuras	v
Resumen	vii
Abstract	viii
I.INTRODUCCIÓN	01
II.ESTRATEGIA METODOLÓGICA	02
2.1. Destilación Extractiva	02
2.2. Diseño de columnas de destilación extractiva	12
2.3. El modelamiento	15
2.4. La Simulación	17
2.5. Selección del software de simulación	22
2.6. Metodología	24
2.7. Procedimiento de la Investigación	25
2.7.1. Planteamiento del modelo	27
2.7.2. Inicialización de la simulación	28
2.7.3. Construcción del Diagrama de Flujo	32
III.RESULTADOS	40
IV.DISCUSIÓN	53
V.CONCLUSIONES	56
VI.RECOMENDACIONES	57
VII.REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS	58

Índice de Tablas

Tabla 1 Condiciones de Operación y Alimentación	35
Tabla 2 Desempeño del Condensador/Etapa superior (Resumen)	41
Tabla 3 Desempeño del Reboiler/Etapa Fondos (Resumen)	42
Tabla 4 Balance Materia y Energía de la Columna	42
Tabla 5 Fracción dividida en corrientes de producto	43
Tabla 6 Perfiles de Presión, Temperatura, Flujos y Entalpías (TPFQ)	45
Tabla 7 Composiciones molares de líquidos por etapa (TPFQ)	46
Tabla 8 Composiciones molares de vapor por etapa (TPFQ)	47
Tabla 9 Perfil de Temperatura, Heat duty y Entalpías (TPFQ)	48
Tabla 10 Perfil de Temperatura y Flujos por etapas (TPFQ)	49
Tabla 11 Valores K Vapor-Líquido por etapa de equilibrio	50
Tabla 12 Balance de Materia y Energía en corrientes de entrada y salida	52
Tabla 13 Comparación de los modelos termodinámicos	55

Índice de Figuras

Figura 1	Composición del vapor a presión constante	02
Figura 2	Tipos de comportamiento azeotrópico	03
Figura 3	Destilación azeotrópica para la separación de etanol del agua	05
Figura 4	Perfil composición para destilación azeotrópica etanol-agua	06
Figura 5	Diagrama de equilibrio del iso octano – fenol	10
Figura 6	Destilación extractiva de tolueno-iso-octano con fenol	11
Figura 7	Grados de libertad de diseño para la columna extractiva	13
Figura 8	Esquema de estudio de simulación	18
Figura 9	Esquema del proceso de modelado y simulación.	23
Figura 10	Diagrama de Flujo y condiciones de alimentación y operación	27
Figura 11	Selección del modelo Riguroso RadFrac	28
Figura 12	Selección de las unidades de medida	29
Figura 13	Especificación de los componentes	29
Figura 14	Selección del modelo termodinámico – 1	30
Figura 15	Selección del modelo termodinámico – 2	31
Figura 16	Simulación inicializada-1	31
Figura 17	Simulación inicializada-2	32
Figura 18	Configuración de los reportes de las corrientes	32
Figura 19	Ventana inicial de la simulación	33
Figura 20	Selección del modelo de destilación RadFrac	34
Figura 21	Construcción del Diagrama de Flujo	35
Figura 22	Especificación de las corrientes de alimentación-1	36
Figura 23	Especificación de las corrientes de alimentación-2	36
Figura 24	Especificación condiciones de operación de la columna-1	37
Figura 25	Especificación condiciones de operación de la columna-2	37
Figura 26	Especificación condiciones de operación de la columna-3	38
Figura 27	Panel Control visualizando la ejecución de la simulación	39
Figura 28	Resumen de la corrida de simulación	40
Figura 29	Procedimiento para visualizar los resultados de la simulación	41
Figura 30	Resultado General de la simulación	42
Figura 31	Perfiles de Presión, Temperatura, Flujos y Entalpías (TPFQ)	44

Figura 32 Perfil de Composición molar Líquidos (TPFQ)	46
Figura 33 Perfil de Composición molar Vapor (TPFQ)	47
Figura 34 Perfil de Temperatura (TPFQ)	48
Figura 35 Perfil de Presión (TPFQ)	49
Figura 36 Perfil de Flujos por etapas (TPFQ)	50
Figura 37 Perfil de Valores-K Vapor-Líquido	51
Figura 38 Resultado General de las corrientes	51
Figura 39 PFD de los modelos de la simulación	54

Resumen

Los procesos de destilación extractiva pueden separar mezclas finas, incluidas mezclas azeotrópicas de punto de ebullición más bajo o más alto y mezclas de volatilidad relativamente baja. Después de la destilación azeotrópica, la extracción alimentada en otro lugar que no sea la mezcla principal induce la extracción dentro de la columna. Los criterios generales de factibilidad indican que los insertos medianos a livianos y los insertos no homogéneos son apropiados junto con los insertos pesados comunes. Para cada tipo de insumo, definimos una clase de diferenciación extraíble que combina la región de viabilidad, el resultado a lograr y los límites de la relación insumo-alimentación. Dependiendo de la clase de separación, la configuración de la columna de separación directa o indirecta permite la detección del destilado o del producto de fondo. La separación de mezclas aromáticas/alifáticas como tolueno-metilciclohexano es muy difícil por destilación fraccionada convencional debido a los puntos de ebullición cercanos de ambos componentes (pb: 110,8 °C y 101 °C). Los métodos para aislar la mezcla se dividen por la cantidad de compuestos aromáticos presentes en la mezcla. Por lo tanto, la extracción líquido-líquido produce del 20 al 65 % en peso de sustancias aromáticas, la destilación extractiva produce del 65 al 90 % en peso y la destilación azeotrópica produce más del 90 % en peso de sustancias aromáticas en la mezcla. Los solventes orgánicos comúnmente usados para la destilación extractiva de mezclas aromáticas/alifáticas han sido reportados en la literatura, incluyendo N-metil-2-pirrolodona (NMP), dimetilformamida (DMF), fenol y otros.

El fenol fue elegido como solvente de extracción para esta tesis.

Palabras clave: modelado, simulación, destilación extractiva, purificación, metilciclohexano.

Abstract

Extractive distillation processes can separate fine mixtures, including lower or higher boiling azeotropic mixtures and mixtures of relatively low volatility. After azeotroping, extraction fed elsewhere than the main mixture induces extraction within the column. General feasibility criteria indicate that medium to light inserts and inhomogeneous inserts are appropriate along with common heavy inserts. For each type of input, we define an extractable differentiation class that combines the region of viability, the outcome to be achieved, and the limits of the input-feed relationship. Depending on the separation class, the direct or indirect separation column configuration allows the detection of the distillate or the bottom product. The separation of aromatic/aliphatic mixtures such as toluene-methylcyclohexane is very difficult by conventional fractional distillation due to the close boiling points of both components (bp: 110.8 °C and 101 °C). The methods for isolating the mixture are divided by the amount of aromatic compounds present in the mixture. Thus, liquid-liquid extraction produces 20 to 65% by weight of aromas, extractive distillation produces 65 to 90% by weight, and azeotropic distillation produces more than 90% by weight of aromas in the mixture. Organic solvents commonly used for the extractive distillation of aromatic/aliphatic mixtures have been reported in the literature, including N-methyl-2-pyrrolodone (NMP), dimethylformamide (DMF), phenol, and others.

Phenol was chosen as the extraction solvent for this thesis.

Keywords: modeling, simulation, extractive distillation, purification, methylcyclohexane.

I. INTRODUCCIÓN

Los hidrocarburos aromáticos como el benceno, el tolueno, el etilbenceno y el xileno (fracciones BTX) son productos importantes del procesamiento del petróleo y tienen una amplia aplicación en la industria química y especialmente en la petroquímica. Además, son componentes de alto octanaje de las gasolinas que aumentan la calidad de los productos finales. En la actualidad, la mezcla de tolueno-metilciclohexano es de mayor interés ya que se prueba como portador para la transmisión de hidrógeno [1].

La materia prima que ingresa a la unidad de etileno, dependiendo de si se trata de fracciones de nafta o gas, contiene de 10 a 25 % en masa de hidrocarburos aromáticos en promedio. Los aromáticos son sustancias indeseables en la unidad productora de etileno porque ocupan gran parte de los hornos reduciendo su capacidad y eficiencia térmica. Otra desventaja de la presencia de compuestos aromáticos en la unidad de pirólisis es que provocan en gran medida coquización, es decir, ensuciamiento del horno.

Por estas razones, la separación de los compuestos aromáticos de la materia prima de la unidad de etileno es importante incluso antes de que entren en los hornos de pirólisis. En este caso, la capacidad total y la eficiencia térmica del horno aumentan y la tasa de coquización de las plantas disminuye.

La difícil separación de los aromáticos de los hidrocarburos alifáticos se debe a los puntos de ebullición cercanos de estas sustancias ya la formación de mezclas azeotrópicas de componentes individuales. El método convencional y comúnmente usado para la separación de mezclas con un contenido de aromáticos en el rango de 20-65% en masa es la extracción líquida.

La destilación extractiva es generalmente adecuada para la separación de mezclas con contenido de aromáticos en el rango de 65-90 % en masa, mientras que las mezclas con alto contenido de hidrocarburos aromáticos (más del 90 % en masa) se separan mediante destilación azeotrópica [2].

II. ESTRATEGIA METODOLÓGICA

Se presenta un marco teórico, para luego abordar la metodología de investigación.

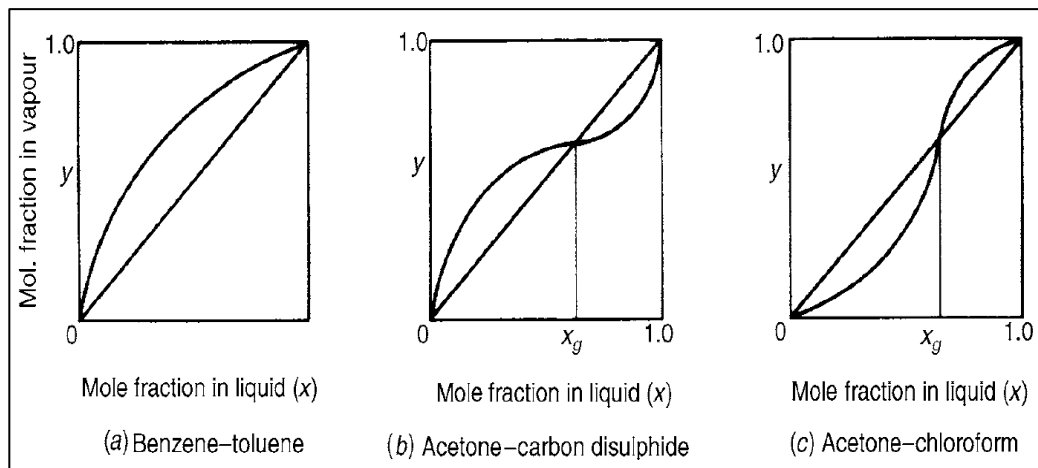
2.1. Destilación Extractiva

En los sistemas considerados, la fase vapor es cada vez más rica en el compuesto liviano en etapas sucesivas. Hay dos tipos de mezclas en las que este aumento constante en la concentración del componente más volátil no se produce o se produce tan lentamente que se requiere un número antieconómico de platos. Si, por ejemplo, se destila una mezcla de etanol y agua, la concentración del alcohol aumenta constantemente hasta alcanzar el 96 por ciento en masa, cuando la composición del vapor es igual a la del líquido y no se produce más enriquecimiento.

Esta mezcla se llama azeótropo y no se puede separar por destilación directa. Tal condición se muestra en las curvas $y - x$ de la Figura 1, donde se ve que la curva de equilibrio cruza la diagonal, lo que indica la existencia de un azeótropo [3].

Figura 1

Composición del vapor en función de la composición del líquido a presión constante.

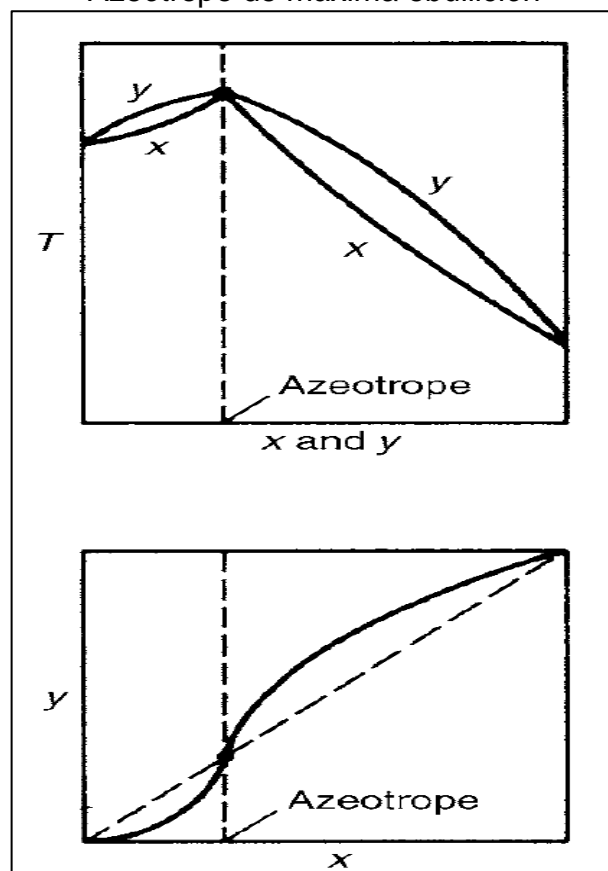


Fuente: Richardson, Harker, & Backhurst (2002)

Se han encontrado un gran número de mezclas azeotrópicas, algunas de gran importancia industrial, como agua-ácido nítrico, agua-ácido clorhídrico y agua-alcoholes. Cuando el coeficiente de actividad es mayor que la unidad, dando una desviación positiva de la ley de Raoult,

las moléculas de los componentes del sistema se repelen y ejercen una presión parcial mayor que si su comportamiento fuera ideal. Esto conduce a la formación de un azeótropo de “ebullición mínima” que se muestra en la Figura 2. Para valores del coeficiente de actividad menores que la unidad, la desviación negativa de la ley de Raoult da como resultado una presión parcial más baja y la formación de un azeótropo de “ebullición máxima”, como se muestra en la Figura 2.

Figura 2
Tipos de comportamiento azeotrópico
Azeótropo de máxima ebullición



Fuente: Richardson, Harker, & Backhurst (2002)

El segundo tipo de problema ocurre cuando un compuesto binario tiene una volatilidad muy baja, en cuyo caso su destilación continua para dar productos casi puros requerirá altas relaciones de reflujo con los correspondientes altos requerimientos de calor.

Además, necesitará una torre con gran sección transversal que contenga muchas bandejas. Un ejemplo del segundo tipo de problema es separar

el n-heptano del metilciclohexano cuando la volatilidad es sólo de 1,08 y se requiere una gran cantidad de etapas para lograr la separación. El principio de destilar extractiva y azeotrópicamente radica en añadir una nueva sustancia a la mezcla para aumentar la volatilidad entre los dos componentes clave y, por lo tanto, hacer que la separación sea relativamente fácil [3].

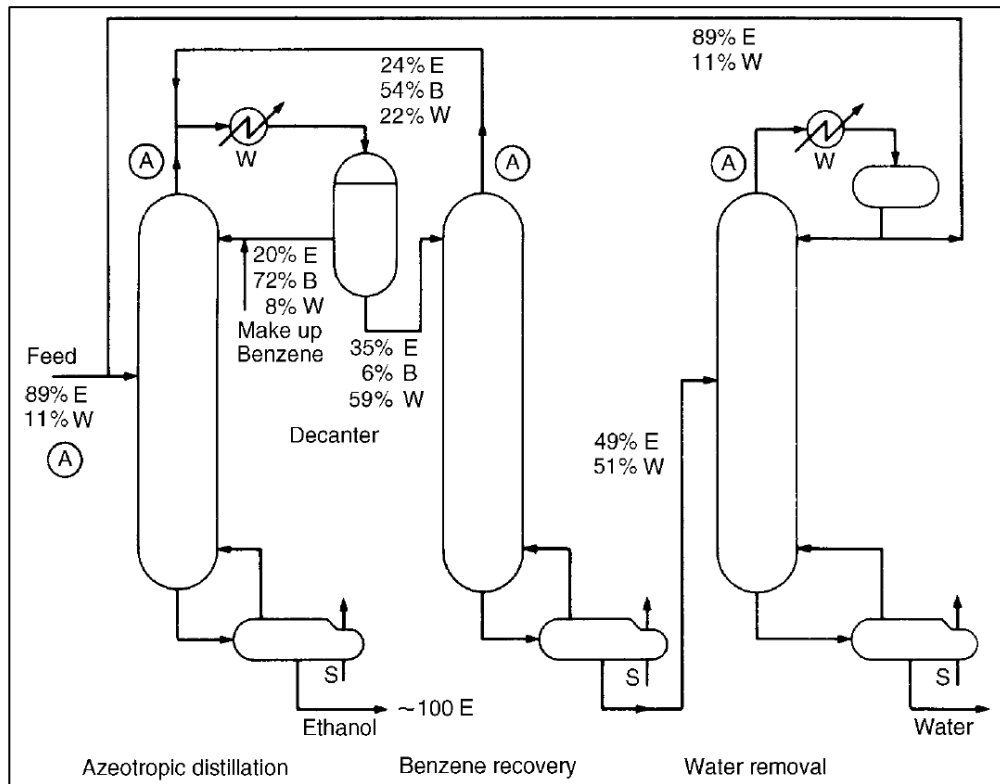
Algunos autores han definido estos dos procesos de la siguiente manera. En la destilación azeotrópica, la sustancia añadida forma un azeótropo con uno o más de los componentes de la mezcla y, como resultado, está presente en la mayoría de los platos de la columna en concentraciones apreciables. Para el caso de destilar extractivamente, la sustancia añadida es relativamente no volátil con respecto a los compuestos para separar y, por lo tanto, se alimenta continuamente cerca del tope o al primer plato de la torre destiladora. Este agente extractivo corre por la columna como reflujo y está presente en concentraciones apreciables en todas las placas. El tercer componente agregado a la mezcla binaria a veces se conoce como el agente de arrastre o el solvente [3].

Destilación azeotrópica

En 1902 se descubrió que si se agrega benceno al azeótropo etanol-agua, se forma un azeótropo ternario con un punto de ebullición de 338,0 K, que es menor que el del azeótropo binario, 351,3 K. El azeótropo industrial en la obtención de etanol a partir del azeótropo, usando este principio, y la disposición general de la planta es como se observa en el esquema que muestra la Figura 3. Esto requiere el uso de tres columnas de fraccionamiento a presión atmosférica y un separador o decantador continuo de líquidos de dos fases.

Figura 3

Destilación azeotrópica separación etanol-agua utilizando benceno como extractor. Las composiciones se dan en porcentaje molar. E = Etanol, B = Benceno, W = Agua, S = Vapor



Fuente: Richardson, Harker, & Backhurst (2002)

El azeótropo presente en el compuesto binario etanol-agua tiene una composición de 89 por ciento molar en alcohol etílico. Partiendo de un sistema que contenga una menor proporción de etanol, no es posible obtener un producto más rico en etanol que éste por destilación binaria normal. Existen condiciones casi azeotrópicas en los puntos marcados con la letra A (Figura 3). La adición del extractor del benceno relativamente no polar sirve para volatilizar el agua, una molécula altamente polar, en mayor medida que el alcohol etílico (etanol), una molécula moderadamente polar, obteniéndose un producto de etanol virtualmente puro [4].

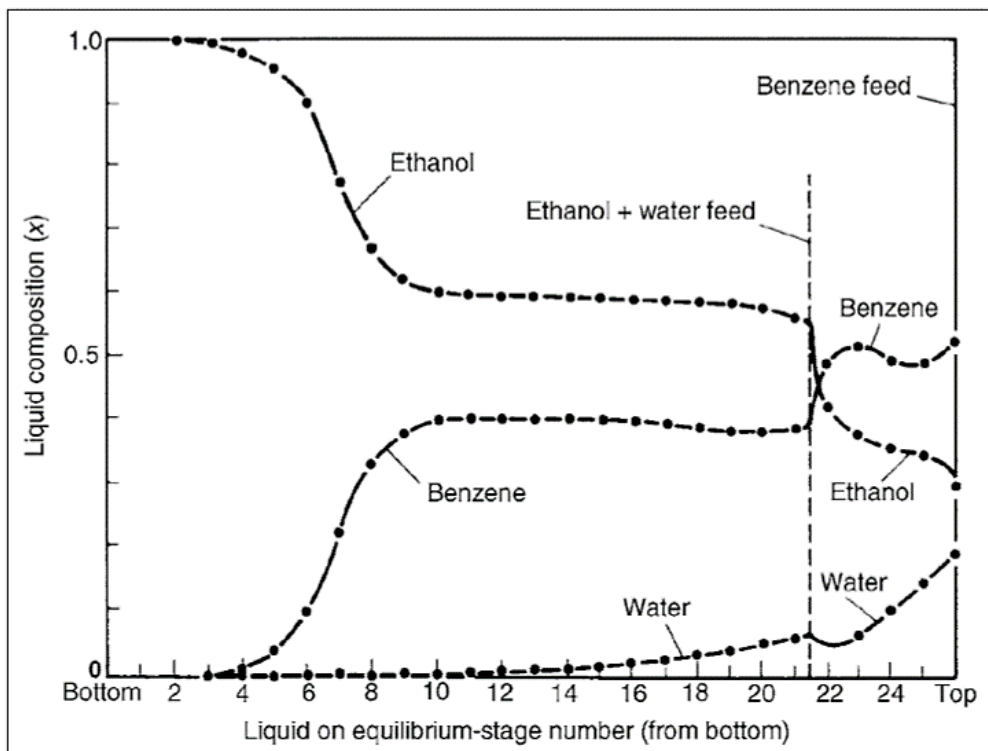
A condiciones de equilibrio para este sistema se puede determinar el número de placas requeridas. La primera torre (Figura 3) da el azeótropo ternario como vapor de cabeza y etanol casi puro en los fondos de la columna. El azeótropo ternario se condensa y se divide en dos fases

líquidas en el decantador. La fase rica en benceno del decantador sirve como reflujo, mientras que la fase rica en agua y etanol pasa a dos torres, una para la recuperación del benceno y la otra para la eliminación del agua.

Las cabezas azeotrópicas de estas torres sucesivas se devuelven a los puntos apropiados en la torre principal. La Figura 4 muestra un perfil de composición para una torre destiladora azeotrópica para el proceso que se mostró (Figura 3) [5].

Figura 4

Perfil de composición para la destilación azeotrópica de etanol y agua, con benceno como agente de arrastre.



Fuente: F. Petlyuk (2004)

Destilación extractiva (DE) es una técnica de separación efectiva para mezclas de azeótropos o mezclas de p.e. (punto de ebullición) cercano. Se agrega un solvente polar, agente de arrastre o separador con alto punto de ebullición para interactuar con los componentes en las mezclas azeotrópicas o de punto de ebullición cercano. El solvente cambia la volatilidad relativa del componente a separar.

La DE tiene la ventaja de que hay un cambio en las fugacidades en una mezcla de componentes apropiados. La fugacidad es la presión de vapor parcial corregida en la mezcla. El cambio en la fugacidad se produce al existir diferentes interacciones repelentes entre los tipos individuales de las moléculas. Un componente de la mezcla que tenga fuerzas de repulsión más fuertes que los otros componentes pasará a la fase de vapor más fácilmente que un componente con fuerzas de repulsión más bajas.

En la DE se añade un disolvente del que se sabe que es capaz de aumentar selectivamente la fugacidad de uno o varios componentes. En el caso de mezclas de hidrocarburos que contienen aromáticos, los componentes alifáticos de la mezcla frecuentemente tienen fuerzas de repulsión más fuertes frente al solvente, por lo que su fugacidad aumenta considerablemente [6].

Esta es una técnica que se utiliza para la separación de mezclas binarias que son difíciles de separar por fraccionamiento ordinario. Esto sucede cuando la mezcla a separar tiene una volatilidad relativa muy baja, en cuyo caso se puede requerir una alta relación de reflujo y más platos, o cuando la mezcla forma un azeótropo. En tales circunstancias, se adiciona otro componente llamado "entrenador" a la mezcla binaria para formar un nuevo heteroazeótropo de bajo p. e. con alguno de los elementos originales cuya volatilidad es tal que puede separarse del otro constituyente original.

Un ejemplo típico se presenta cuando se demuestra la operación de separar ácido acético (BP: 118,1 °C) y agua (BP: 100 °C). Esta mezcla tiene una volatilidad relativa baja y, por lo tanto, la separación por métodos convencionales no es económica. Aquí se añade acetato de butilo, que es ligeramente soluble en agua, a la mezcla desde la parte superior de la columna como agente de arrastre. Forma un 'heteroazeótropo' con toda el agua en alimentación y se destila fácilmente del ácido acético con alto p. e. y el ácido acético sale como un producto residual [4].

El heteroazeótropo por condensación forma dos capas insolubles que se pueden separar fácilmente. La capa de agua obtenida se satura con éster y viceversa. La capa de éster saturada con agua se devuelve al destilador como fuente de arrastre para una mayor separación. La capa acuosa también se transporta hacia otra torre para separar el agua y el éster. El éster separado también se devuelve como operador de arrastre.

A veces, el nuevo azeótropo formado contiene los tres constituyentes. En la deshidratación de la mezcla de etanol y agua, se añade benceno como agente de arrastre que da un azeótropo ternario que contiene benceno (53,9 mol %), agua (3,3 mol %) y etanol (22,8 mol %) que hierve a 64,9 °C como destilado y etanol (BP: 78,4°C) como residuo [4].

El benceno se separa y se devuelve al primer plato o etapa en el tope de la torre como arrastrador. Dado que el agua y el etanol están igualmente presentes en el destilado, la mezcla debe someterse a una rectificación preliminar para producir un azeótropo binario rico en alcohol. La destilación azeotrópica se muestra en la Figura 3.

La DE es una técnica de separación efectiva para mezclas de azeótropos o mezclas de p. e. cercano. Se agrega un solvente polar, agente de arrastre o separador con alto punto de ebullición para interactuar con los componentes en las mezclas azeotrópicas o de punto de ebullición cercano. El solvente cambia la volatilidad relativa del componente a separar [7].

La destilación extractiva tiene la ventaja de que hay un cambio en las fugacidades en una mezcla de componentes apropiados.

El disolvente añadido tiene, sin embargo, baja volatilidad y en sí mismo no se vaporiza apreciablemente en el fraccionador. Para una mezcla binaria no ideal, la presión parcial se puede expresar como:

$$P_A = \gamma_A P_A^o x_A$$

$$P_B = \gamma_B P_B^o x_B$$

donde γ_A y γ_B son los coeficientes de actividad de los dos componentes.

Por lo tanto, la volatilidad relativa α puede escribirse como:

$$\alpha = \frac{P_A}{P_B} \frac{x_B}{x_A} = \frac{\gamma_A}{\gamma_B} \frac{P_A^o}{P_B^o}$$

El solvente agregado a la mezcla en la destilación extractiva afecta diferencialmente las actividades de los dos componentes y, por lo tanto, la volatilidad relativa, α . Tal proceso depende de la diferencia en la desviación de la idealidad entre el solvente y los componentes de la mezcla binaria a separar.

En el siguiente ejemplo, tanto el tolueno como el isooctano forman por separado soluciones líquidas no ideales con fenol, aunque el grado de no idealidad con isooctano es mayor que con tolueno. Cuando las tres sustancias están presentes, por lo tanto, el tolueno y el isooctano se comportan como una mezcla no ideal y su volatilidad relativa se vuelve alta. Un ejemplo de destilación extractiva dado por Treybal (1997) es la separación de tolueno, punto de ebullición 384K, de hidrocarburos parafínicos de aproximadamente el mismo peso molecular. Esto es muy difícil o imposible, debido a la baja volatilidad relativa o la formación de azeótropos, pero tal separación es necesaria en la recuperación de tolueno de ciertas mezclas de hidrocarburos de petróleo [8].

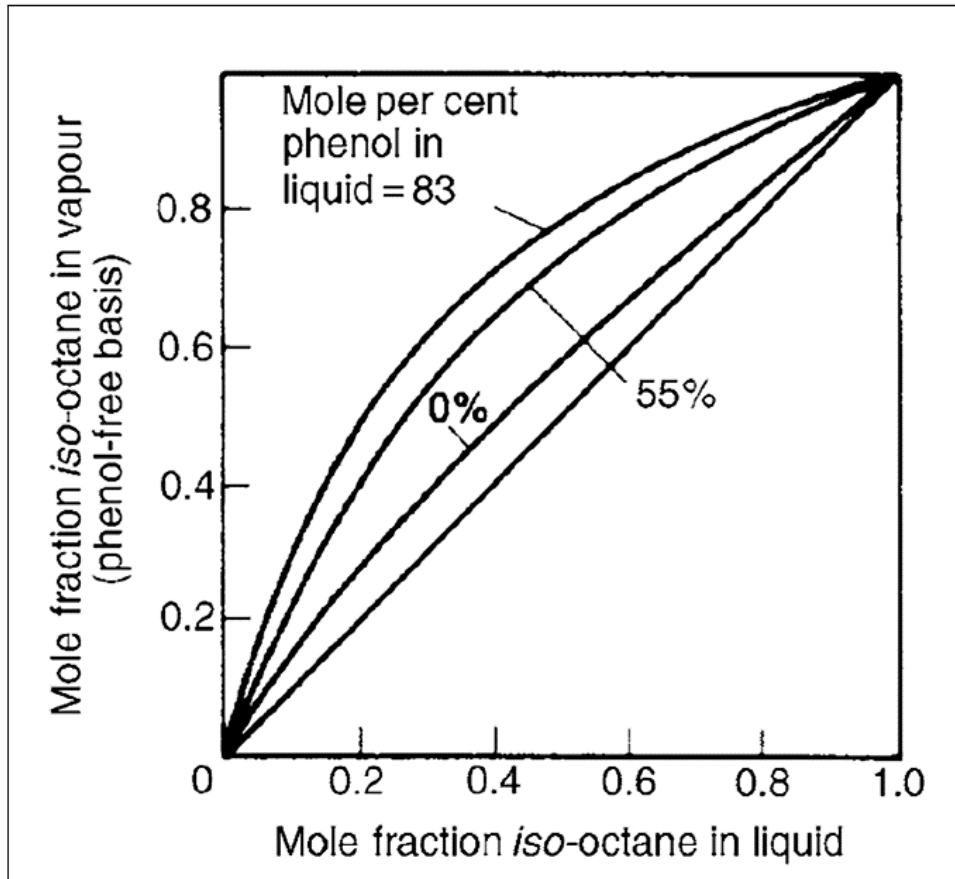
Usando isooctano con un punto de ebullición de 372.5 K, como ejemplo de un hidrocarburo de parafina, la Figura 5 muestra que el isooctano en esta mezcla es el más volátil, aunque la separación es obviamente difícil. Sin embargo, en presencia de fenol, con un punto de ebullición de 454,6 K, aumenta la volatilidad relativa del isooctano, de modo que, con un 83 por ciento en moles de fenol en el líquido, la separación del tolueno es relativamente fácil [3].

En Figura 6 se observa un PFD de un proceso para obtener esto, donde la mezcla binaria se introduce más o menos centralmente en la torre de DE, y el fenol como solvente se introduce cerca del primer plato superior para que esté presente en alta concentración en la mayoría de las bandejas de la torre. En estas condiciones, el isooctano se destila fácilmente como un producto de cabeza, mientras que el tolueno y el fenol se eliminan como residuos. Aunque el fenol tiene un p. e.

relativamente alto, su presión del vapor es suficiente para que aparezca algo en la corriente producto de cabeza.

Figura 5

Diagrama de equilibrio del iso octano - fenol

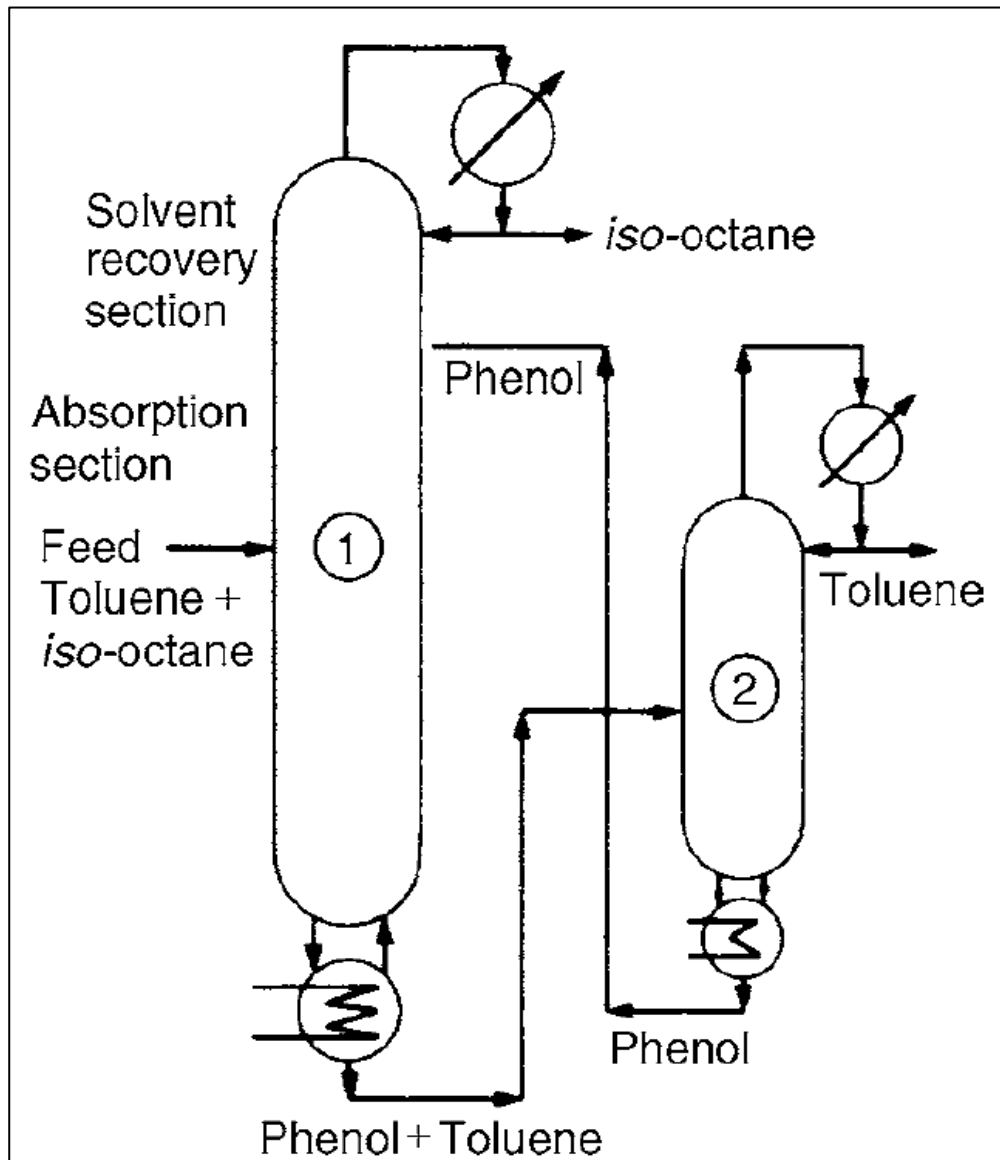


Fuente: Richardson, Harker, & Backhurst (2002)

La zona de regeneración del solvente en columna, puede ser relativamente corta, sirve para separar el fenol del isooctano. El residuo debe ser rectificado en la torre auxiliar para separar el tolueno del fenol que se recicla, pero esta operación es razonablemente fácil. En la práctica, el hidrocarburo de parafina es una mezcla en lugar de isooctano puro, aunque el principio de funcionamiento sigue siendo el mismo.

Figura 6

Destilación extractiva de tolueno-iso-octano con fenol



Fuente: Richardson, Harker, & Backhurst (2002)

El disolvente a utilizar se selecciona en base a la selectividad, la volatilidad, la facilidad de separación de los productos superior e inferior y el coste. La selectividad se evalúa más fácilmente determinando el efecto sobre la volatilidad relativa de los dos componentes clave de la adición del disolvente. Cuanto más volátil es el disolvente, mayor es el porcentaje de disolvente en el vapor y peor es la separación para un consumo de calor dado en la caldera.

Es importante señalar: el disolvente no establecerá un azeótropo con ningún elemento o componente. Algunos de los problemas de selección del solvente cuando dos compuestos muestran desviaciones de la ley de Raoult, entonces uno de estos compuestos muestra el mismo tipo de desviación con cualquier miembro de la serie homóloga del otro componente.

Por tanto, el mix azeotrópico de acetona (p.e. 329,6 K)-metanol (p.e. 337,9 K) tiene 20 por ciento en moles de acetona y hierve a 328,9 K, que es menor que el p. e. de cualquiera de los compuestos del mix. Así, cualquier miembro de la serie etanol (p.e. 357,5 K), propanol (p.e. 370,4 K), agua (p.e. 373,2 K), butanol (p.e. 391,0 K) puede usarse como agente extractivo, o en la serie de cetonas, metilo n -propilcetona (p.e. 375 K) y metilisobutilcetona (p.e. 389,2 K) [3].

La ventaja de usar un solvente de la serie del alcohol es que la acetona más volátil se llevará por encima, aunque el agua tendría la ventaja de ser económica. Se han dado detalles de un método de cálculo para la destilación extractiva, utilizando como ejemplo el sistema acetonitrilo-tricloroetileno-agua. La destilación extractiva suele ser más deseable que la destilación azeotrópica, ya que no es necesario vaporizar grandes cantidades de disolvente.

Además, es posible una mayor elección de componente añadido ya que el proceso no depende del accidente de la formación de azeótropos. Sin embargo, no puede llevarse a cabo convenientemente en operaciones por lotes. Los equipos azeotrópicos y de destilación extractiva pueden diseñarse utilizando los métodos generales para la destilación multicomponente.

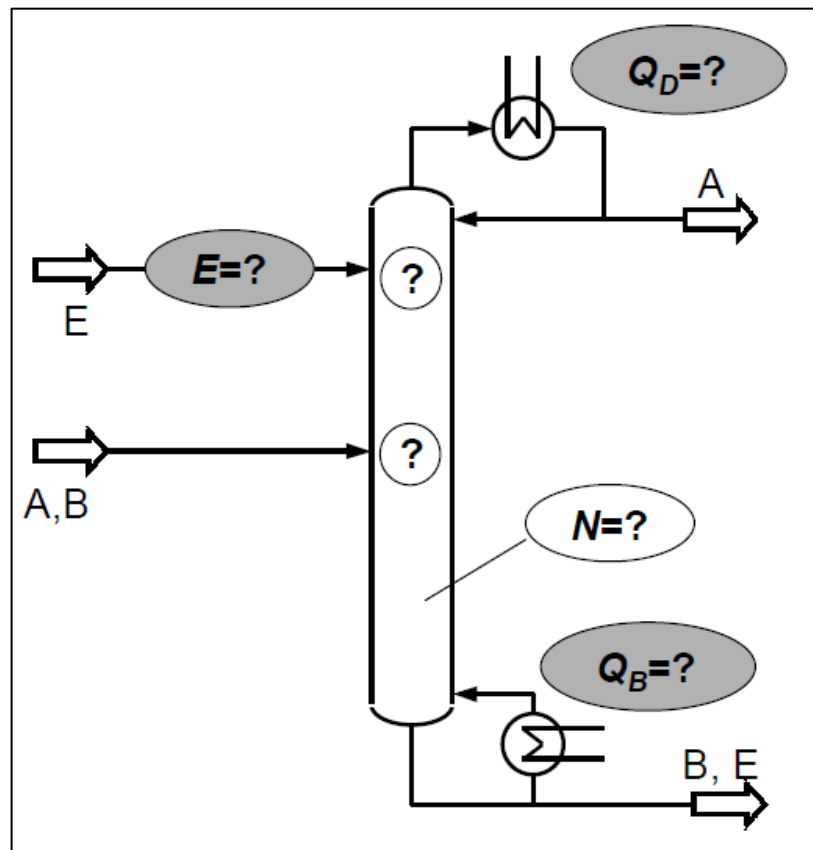
2.2. Diseño de Torres de DE

La DE se emplea comúnmente como método de separación que muestran azeótropos de ebullición mínima. En la torre extractora, un elemento de arrastre de alto p. e. se añade a un plato por encima de la alimentación principal. El arrastrador facilita la separación al interactuar con el mix azeotrópico y alterar el equilibrio termodinámico en la zona extractiva.

La Figura 7 muestra la configuración para una fuente de proceso binario. El elemento de arrastre pesado E preferentemente se asocia al componente B y lo baja por la torre. Por tanto, se recupera un mix binario de B y E en el fondo de la torre, mientras que se obtiene A de alta pureza en el producto destilado. La viabilidad de la separación y el costo del proceso se caracterizan por dos parámetros principales: el caudal de alimentación del arrastrador y la relación de reflujo (o las cargas térmicas del condensador y del rehervidor, consulte los grados de libertad sombreados en el esquema siguiente).

Figura 7

Grados de libertad de diseño para la torre extractora



Fuente: Robinson S. (2004)

El enfoque estándar para el diseño de procesos de tales procesos de separación generalmente implica la especificación detallada de todos los parámetros de diseño relevantes: el número de platos, la ubicación de

los platos de alimentación del proceso y del arrastrador y la relación de reflujo [9].

Esta configuración de columna se analiza usando un simulador de proceso estándar como Aspen Plus o Aspen Hysys. El ingeniero de diseño se queda con la difícil tarea de cambiar iterativamente las variables de diseño y repetir este proceso hasta que se cumplan todas las restricciones de diseño, como las purezas requeridas, etc., y se logre la convergencia. Tal diseño basado en simulación es un buen método para especificar todas las variables de diseño relevantes, sin embargo, también es una tarea bastante tediosa y que requiere mucho tiempo.

En las primeras etapas de la síntesis de procesos se pueden formular un gran número de alternativas de diseño diferentes. Un buen ejemplo es la purificación de una mezcla binaria de alcohol y agua que puede lograrse mediante destilación heteroazeotrópica utilizando un agente de arrastre heterogéneo, destilación extractiva utilizando un agente de arrastre homogéneo o utilizando una configuración de destilación de membrana híbrida.

Tanto para los procesos de destilación azeotrópica homogéneos como para los heterogéneos, la elección del agente de arrastre, generalmente de una lista de candidatos potenciales, define la estructura del proceso y es crucial para el rendimiento económico. Entonces, el número de alternativas de diseño estructuralmente diferentes crece fácilmente demasiado para ser abordado de manera efectiva utilizando herramientas de simulación. Por lo tanto, existe la necesidad de algoritmos simples y rápidos que respalden la selección de procesos y proporcionen una estimación del potencial económico [7].

Los métodos abreviados para determinar la demanda mínima de energía del destilador son muy adecuados para esta tarea porque permiten una evaluación rápida del proceso sin necesidad de información detallada de la unidad y presentan una visión valiosa de las limitaciones termodinámicas del mix.

Para separar mezclas ideales, el método abreviado de Underwood es una herramienta estándar para el diseño.

En los últimos 20 años varios grupos de investigación han propuesto criterios geométricos para determinar la demanda energética mínima en destilación no ideal. Se presenta una revisión crítica de métodos más avanzados y proponen un nuevo método completamente general en separar mezclas arbitrarias de múltiples componentes no ideales para torres de alimentación única. Para la destilación extractiva en columnas con múltiples corrientes de alimentación falta un método de diseño general.

En una publicación reciente, se ha presentado un nuevo método de diseño que es aplicable a un número arbitrario de componentes y puede automatizarse por completo. La factibilidad y operatividad de las columnas extractivas están relacionadas con el análisis no lineal del mapa pinch de la sección extractiva. Se alcanza un límite inferior para la alimentación del arrastrador, así como un límite inferior y superior para el ratio de reflujo partiendo desde un análisis de bifurcación de este mapa pinch [5].

El método abreviado se amplía para columnas con múltiples flujos de alimentación. Este artículo de conferencia presentará la implementación de este método de diseño que separa mezclas ternarias y cuaternarias en una torre extractora.

Además del reflujo mínimo, que limita la viabilidad de todas las separaciones zeotrópicas y azeotrópicas, existe un reflujo máximo por arriba del cual no se logra la separación. Estos límites para la relación de reflujo dependen del caudal de alimentación del arrastrador. El rango de opciones factibles para la relación de reflujo disminuye con la disminución de los caudales de arrastre. Por debajo de un caudal de arrastre mínimo, el efecto extractivo ya no es suficiente para separar y no se encuentra un ratio de reflujo viable [6].

2.3. El modelamiento

El modelado y la simulación: es una disciplina para desarrollar un nivel de comprensión del comportamiento de las partes de un sistema y del sistema como un todo. El modelado y la simulación es en gran medida un arte. Uno puede entender acerca de andar en bicicleta leyendo un

libro. Para aprender realmente a andar en bicicleta, uno debe practicar activamente con una bicicleta. El modelado y la simulación siguen el mismo principio. Puede aprender mucho sobre modelado y simulación leyendo libros y hablando con modeladores. La habilidad y el talento para desarrollar modelos y realizar simulaciones solo se desarrollan construyendo modelos y simulándolos [11].

Los modelos se utilizan particularmente en las ciencias básicas y las disciplinas de ingeniería (como química, física, biología, ingeniería química, ingeniería mecánica, ingeniería eléctrica, etc.) y también en las ciencias sociales (como sociología, economía, ciencias políticas, etc.). Por lo tanto, primero deseamos conocer la definición general del modelo y luego conoceremos la definición del modelo de proceso.

Definición de modelo: Un modelo es una representación simplificada de un sistema en algún punto particular en el tiempo y/o espacio destinado a promover la comprensión del sistema real. La palabra modelo en realidad proviene de la palabra latina *modus*, que significa medida. Usado como sustantivo, significa una pequeña representación de un objeto planificado o existente.

La construcción de abstracciones de sistemas (modelos) para facilitar la experimentación y evaluación (simulación) es tanto arte como ciencia. La técnica es particularmente útil para resolver problemas de sistemas complejos donde no se presentan soluciones más fáciles. Los métodos de modelado y simulación también permiten la experimentación que de otro modo sería engorrosa o imposible [11].

Por ejemplo, las simulaciones por computadora han sido responsables de muchos avances en campos como la biología, la meteorología, la cosmología, la dinámica demográfica y la eficacia militar. Sin simulación, el estudio de estos sujetos puede verse inhibido por la falta de accesibilidad al sistema real, la necesidad de estudiar el sistema durante largos períodos de tiempo, la dificultad de reclutar sujetos humanos para experimentos o todos estos factores.

En virtud de que la técnica ofrece soluciones a estos problemas, se erige en una herramienta tremendamente poderosa para examinar las complejidades del mundo cada vez más complejo de hoy. Pese a los

poderosos que pueden ser los métodos de modelado y simulación, aplicarlos al azar puede conducir a conclusiones erróneas. Pese a una base sólida en matemáticas, informática, probabilidad y estadística, la disciplina sigue siendo intuitiva [9].

2.4. La Simulación

Simular un sistema es ejecutar o correr un modelo del sistema. El modelo se puede reconfigurar y experimentar; por lo general, esto es imposible, demasiado costoso o poco práctico de hacer en el sistema que representa. Se puede estudiar el funcionamiento del modelo y, por tanto, se pueden inferir propiedades relativas al comportamiento del sistema real o de su subsistema.

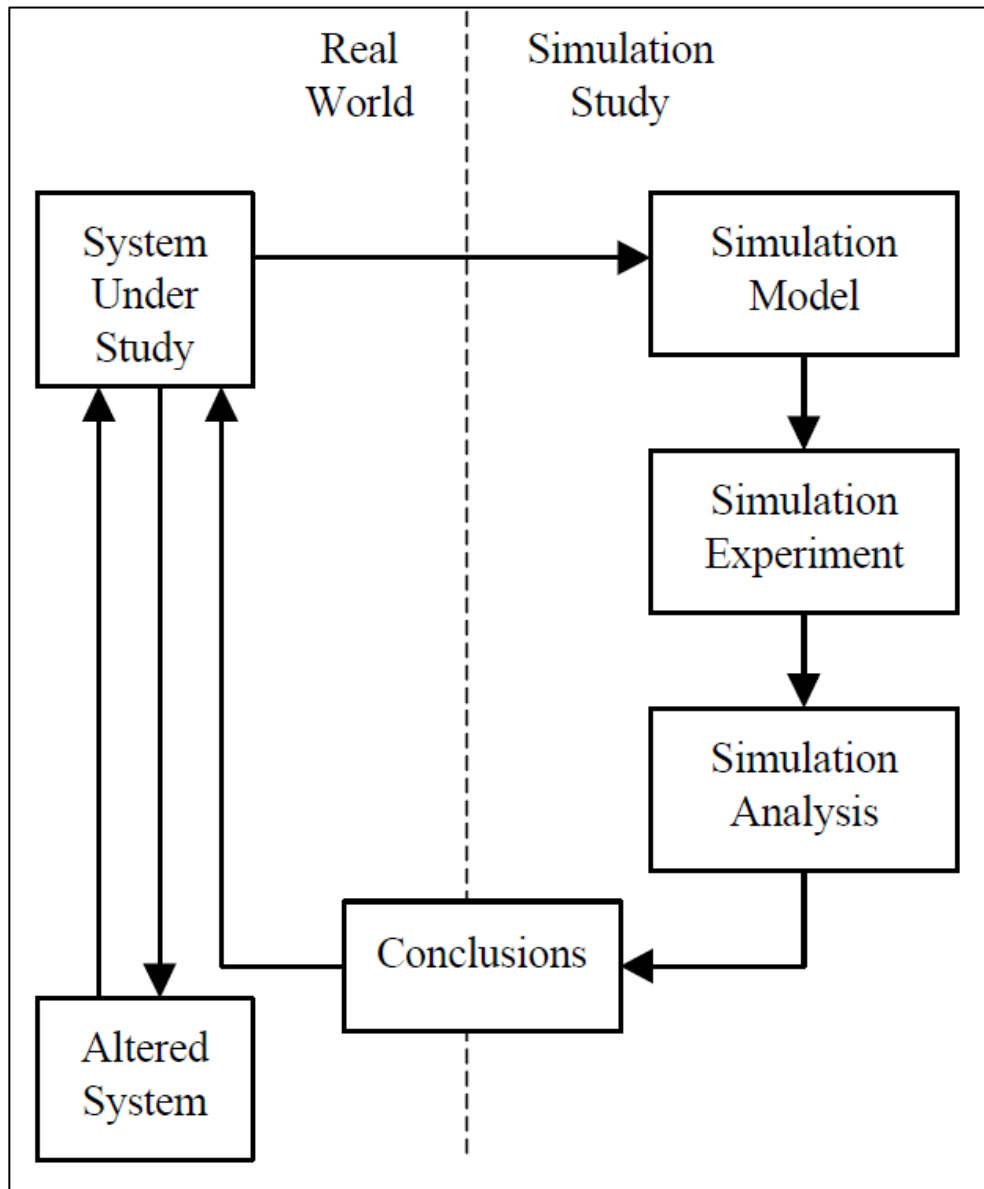
En su sentido más amplio, la simulación es una herramienta para evaluar el desempeño de un sistema, existente o propuesto, bajo diferentes configuraciones de interés y durante largos períodos de tiempo real. La simulación se utiliza antes de que se modifique un sistema existente o se construya un nuevo sistema, para reducir las posibilidades de que no se cumplan las especificaciones, para eliminar cuellos de botella imprevistos, para evitar la subutilización o la sobreutilización de recursos y para optimizar el rendimiento del sistema.

Por ejemplo, la simulación se puede utilizar para responder preguntas como: ¿Cuál es el mejor diseño para una nueva red de telecomunicaciones? ¿Cuáles son los requisitos de recursos asociados? ¿Cómo funcionará una red de telecomunicaciones cuando la carga de tráfico aumente en un 50 %? ¿Cómo afectará un nuevo algoritmo de enrutamiento a su rendimiento? ¿Qué protocolo de red optimiza el rendimiento de la red? ¿Cuál será el impacto de una falla en el enlace? [12].

La Figura 8 es un esquema de un estudio de simulación. La naturaleza iterativa del proceso está indicada por el sistema estudiado que se convierte en sistema alterado que luego se convierte en sistema en estudio y el ciclo se repite.

Figura 8

Esquema de estudio de simulación



Fuente: (Chung, 2004)

Seguidamente se explican los pasos necesarios para desarrollar un modelo de simulación, diseñar un experimento de simulación y realizar análisis de simulación. Aunque este es un orden lógico de los pasos en un estudio de simulación, se pueden requerir muchas iteraciones en varias sub-etapas antes de alcanzar los objetivos de un estudio de simulación. No todos los pasos pueden ser posibles y/o requeridos. Por otro lado, se pueden realizar pasos adicionales [13].

El modelo a simular consiste en: establecimiento del sistema, variables ingresantes, valoración del desempeño e interrelación funcional.

Casi todos los paquetes de software de simulación proporcionan construcciones para modelar cada uno de los componentes anteriores. El modelado es posiblemente la parte más importante de un estudio de simulación. De hecho, un estudio para simular es tan bueno como el modelamiento de simulación.

El modelamiento de simulación comprende:

Localizar el problema.

Enumerar los problemas existentes en el sistema. Producir requisitos para caracterizar el sistema.

Formular el problema.

Seleccione los límites del sistema, el problema o una parte del mismo, a estudiar. Definir el objetivo general del estudio y algunos temas específicos a abordar. Definir medidas de rendimiento: criterios cuantitativos sobre los que se compararán y clasificarán las diferentes configuraciones del sistema. Identificar, brevemente en esta etapa, las configuraciones de interés y formular hipótesis sobre el desempeño del sistema. Decida el marco de tiempo del estudio, es decir, se usará el modelo para una decisión única (p. ej., gastos de capital) o durante un período de tiempo de manera regular (p. ej., programación del tráfico aéreo). Identifique al usuario final del modelo de simulación, por ejemplo, la gerencia corporativa versus un supervisor de producción. Los problemas deben formularse con la mayor precisión posible [13].

Recopilar y ordenar data real del sistema.

Recopile datos sobre condiciones del sistema (p. ej., ancho de banda para redes de comunicación), variables ingresantes, así como el rendimiento en sistema real. Identificar las fuentes de aleatoriedad, es decir, variables ingresantes estocásticas. Seleccione una distribución de probabilidad de entrada apropiada para cada variable ingresante estocástica y estime los parámetros correspondientes.

Formulación y desarrollo del modelamiento.

Desarrolle esquemas y diagramas del sistema (¿cómo fluyen las entidades a través del sistema?). Traducir estos modelos conceptuales a la forma aceptable del software. Verificar que la simulación se ejecute según lo previsto. Las técnicas de verificación incluyen trazas, parámetros de entrada variables sobre su rango aceptable y verificar la salida, sustituir constantes por variables aleatorias y verificar manualmente los resultados y la animación [13].

Verificación del modelamiento.

Compare el rendimiento del modelo en condiciones conocidas con el rendimiento real. Realice pruebas de inferencia estadística y haga pruebas exigentes del sistema. Evalúe la confianza que el usuario final deposita en el modelamiento y aborde los problemas si los hay. Para los principales estudios de simulación, los consultores experimentados abogan por una presentación estructurada del modelo por parte de los analistas de simulación ante una audiencia de expertos en gestión y sistemas. Esto no solo garantiza que los supuestos del modelo sean correctos, completos y consistentes, sino que también mejoran la confianza.

Modelo de desarrollo para futuro.

Objetivos de documento, supuestos y variables ingresantes en detalle. Un experimento de simular es una prueba o una serie de pruebas donde se hacen variaciones relevantes en valores ingresantes para que podamos observar e identificar las razones de evolución en el rendimiento.

Seleccionar el diseño experimental.

Seleccione una medida de rendimiento, algunas variables ingresantes que puedan influir en ella y los niveles de cada variable. Cuando el número de conformaciones posibles es grande y el modelamiento es complejo, las clases de diseño comunes de segundo orden que incluyen el compuesto central.

Establecer las condiciones experimentales para las corridas.

Abordar la cuestión de obtener información precisa y la mayor cantidad de información de cada ejecución. Determine si el sistema es estacionario (la medida de rendimiento no cambia con el tiempo) o no estacionario (la medida de rendimiento cambia con el tiempo). Generalmente, en sistemas estacionarios, el desempeño en estado estable de la respuesta es de interés. Determinar si es adecuada una ejecución de simulación con o sin terminación. Seleccione la longitud de ejecución. Seleccione las condiciones de inicio apropiadas. Seleccione la duración del período de calentamiento, si es necesario. Decida el número de ejecuciones independientes (cada ejecución utiliza un flujo de números aleatorios diferente y las mismas condiciones de inicio) considerando el tamaño de la muestra de datos de salida [13].

Realizar ejecuciones de simulación.

Realizar las ejecuciones de acuerdo con los pasos anteriores.

La mayoría de los paquetes de simulación proporcionan estadísticas de ejecución (media, desviación estándar, valor mínimo, valor máximo) en el rendimiento, por ejemplo, tiempo de expectación (estadística persistente no tiempo), inventario disponible (estadística persistente del tiempo).

A pesar de los hechos de que no hay errores de recopilación de data, el modelamiento subyacente es completamente conocido, y las réplicas y configuraciones están comprobadas por el usuario, el producto simulado es dificultoso de interpretar. Una observación puede deberse a cualidades sistémicas o simplemente a una ocurrencia aleatoria.

Interpretar y presentar resultados.

Calcule las estimaciones numéricas (por ejemplo, media, intervalos de confianza) de la medida de rendimiento deseada para cada configuración de interés. Para obtener intervalos de confianza para la media de los datos autocorrelacionados, se puede utilizar la técnica de medias por lotes. En medios por lotes, la data contigua original de una ejecución se reemplaza por la data más pequeña que contiene los

medios de lotes contiguos de observaciones originales. La suposición de que los medios por lotes son independientes pueden no ser siempre cierto; El aumento del tamaño total de la muestra y aumentar la longitud del lote puede ayudar. Construya pantallas gráficas (por ejemplo, gráficos circulares, histogramas) de los datos de salida. Documentar resultados y conclusiones.

Recomendar más curso de acción.

Esto puede incluir más experimentos para aumentar la precisión y reducir el sesgo de los estimadores, realizar análisis de sensibilidad, etc [13].

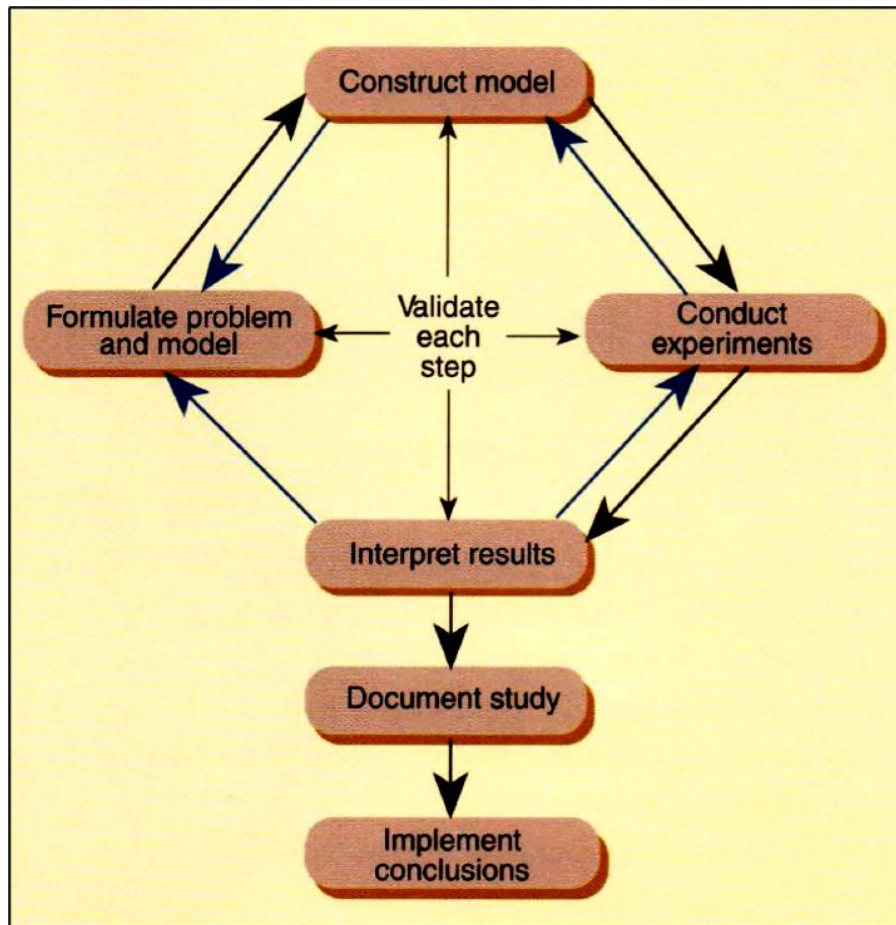
2.5. Selección del software de simulación

Aunque un modelo de simulación se puede construir utilizando lenguajes de programación de propósito general que son familiares para el analista, disponibles en una amplia variedad de plataformas y menos costosos, la mayoría de los estudios de simulación actuales se implementan utilizando un paquete de simulación. Las ventajas son requisitos de programación reducidos; marco natural para el modelado de simulación; orientación conceptual; recopilación automatizada de estadísticas; simbolismo gráfico para la comunicación; animación; y, cada vez más, flexibilidad para cambiar de modelo [14].

Hay cientos de productos de simulación en el mercado, muchos con etiquetas de precio de \$15,000 o más. Naturalmente, surge la cuestión de cómo seleccionar el mejor software de simulación para una aplicación. Las métricas para la evaluación incluyen flexibilidad de modelado, facilidad de uso, estructura de modelado (jerárquico versus plano; orientado a objetos versus anidado), reutilización de código, interfaz gráfica de usuario, animación, gráficos comerciales dinámicos, requisitos de hardware y software, capacidades estadísticas, informes de salida y diagramas gráficos, atención al cliente y documentación.

Los dos tipos de paquetes de simulación son los lenguajes de simulación y los simuladores orientados a aplicaciones.

Figura 9
Esquema del proceso de modelado y simulación.



Fuente: Menner (1995)

Los lenguajes de simulación ofrecen más flexibilidad que los simuladores orientados a aplicaciones. Por otro lado, los lenguajes requieren cantidades variables de experiencia en programación. Los simuladores orientados a aplicaciones son más fáciles de aprender y tienen construcciones de modelado estrechamente relacionadas con la aplicación. La mayoría de los paquetes de simulación incorporan animación que es excelente para la comunicación y se puede utilizar para depurar el programa de simulación; una animación de "aspecto correcto", sin embargo, no es garantía de un modelo válido. Más importante aún, la animación no es un sustituto del análisis de salida [14].

En un estudio de simulación, se requiere la toma de decisiones humanas en todas las etapas, es decir, el desarrollo del modelo, el diseño del experimento, el análisis de resultados, la formulación de conclusiones y la toma de decisiones para alterar el sistema en estudio. La única etapa en la que no se requiere la intervención humana es la ejecución de las simulaciones, que la mayoría de los paquetes de software de simulación realizan de manera eficiente. El punto importante es que un software de simulación potente es simplemente un factor de higiene: su ausencia puede dañar un estudio de simulación, pero su presencia no garantizará el éxito. Los formuladores de problemas y los modeladores y analistas de simulación experimentados son indispensables para un estudio de simulación exitoso.

2.6. Metodología

- Tipo: Aplicada.
- Nivel: Explicativa.
- Población: Los procesos de purificación y separación del metilciclohexano.
- Muestra: El modelado y la simulación de procesos de la destilación extractiva.
- Técnicas e instrumentos de recolección de información: Los cálculos recogidos en los resultados de la convergencia del simulador y de las herramientas adicionales para alcanzar los objetivos del proceso.
- Técnicas de procesamiento y análisis de resultados: Los análisis de procesos, interpretación de gráficos y resultados de las convergencias de los procesos y datos alimentados.
- Diseño: Evaluativa no experimental.
- Tipo de diseño: Correlacional
- Materiales y equipos:
 - Ordenador.
 - Material bibliográfico.
 - Software disponible.

2.7. Procedimiento de la Investigación

El propósito de purificar los aromáticos es hacerlos cumplir con sus especificaciones finales de pureza con respecto a los hidrocarburos no aromáticos. Se realiza por reextracción o por destilación extractiva de las impurezas contenidas en el extracto crudo. En los procesos basados en la reextracción de impurezas, el extracto bruto se envía a un extractor en flujo a contracorriente con un disolvente secundario, por ejemplo, un hidrocarburo parafínico, que puede separarse fácilmente por destilación de los hidrocarburos de la alimentación. Esta operación a menudo se denomina "lavado a contracorriente" [15].

El caudal de hidrocarburo parafínico debe ajustarse para volver a extraer selectivamente las impurezas no aromáticas. Las etapas de extracción y retrolavado se pueden realizar en dos zonas adyacentes del mismo extractor, que se alimenta con el solvente de extracción en la parte superior y con parafina de retrolavado en la parte inferior y la alimentación en un nivel intermedio.

Los procesos basados en la purificación del extracto bruto por destilación extractiva aprovechan que un disolvente que es selectivo en condiciones líquido-líquido también lo es en condiciones vapor-líquido. Al destilar parte de los hidrocarburos en el extracto, por lo tanto, se mejora la pureza de los compuestos aromáticos residuales. El destilado, compuesto por una mezcla de los aromáticos y no aromáticos más volátiles, se devuelve a la etapa de extracción.

Los problemas fundamentales a resolver en la aplicación de esta tecnología son: buscar el disolvente y modelar la mezcla que se forma con él. Si bien los criterios fisicoquímicos son claros, es necesario agregar otras consideraciones en el procedimiento de selección. Además de los aspectos de precio del producto, corrosividad, termosensibilidad y seguridad, es necesario tener en cuenta la fuerza de unión entre el solvente y las moléculas extraídas.

Cuanto más fuerte sea la unión, más costosa será la regeneración del solvente. Esta situación puede conducir a un mayor consumo de energía para la regeneración que la ganancia obtenida en el primer paso. Esta es una de las razones por las que el dominio de aplicación de la

destilación extractiva es limitado. Se vuelve mucho más ventajoso cuando se puede extraer una familia completa de sustancias de un alimento. Además de todos los conceptos básicos de destilación, todos los métodos de cálculo de columnas de destilación se pueden aplicar y utilizar en el dimensionamiento y optimización de instalaciones [15].

Lo que queda por encontrar es la mejor manera de inyectar el solvente en la columna. Aunque es posible inyectar el solvente en la alimentación, generalmente es preferible inyectar en la zona de rectificación si la sustancia "extraída" va a terminar en el residuo para bloquear los productos que tenderían a salir hacia el destilado. Mientras tanto, se prefiere la inyección en la zona de extracción si la sustancia "extraída" va a terminar en el destilado. Cuando los disolventes modifican los coeficientes de actividad en la fase líquida, se pueden comparar mediante el coeficiente de actividad de dilución infinita, que define el poder de extracción, mientras que la relación de estos parámetros para diferentes componentes da la selectividad [15].

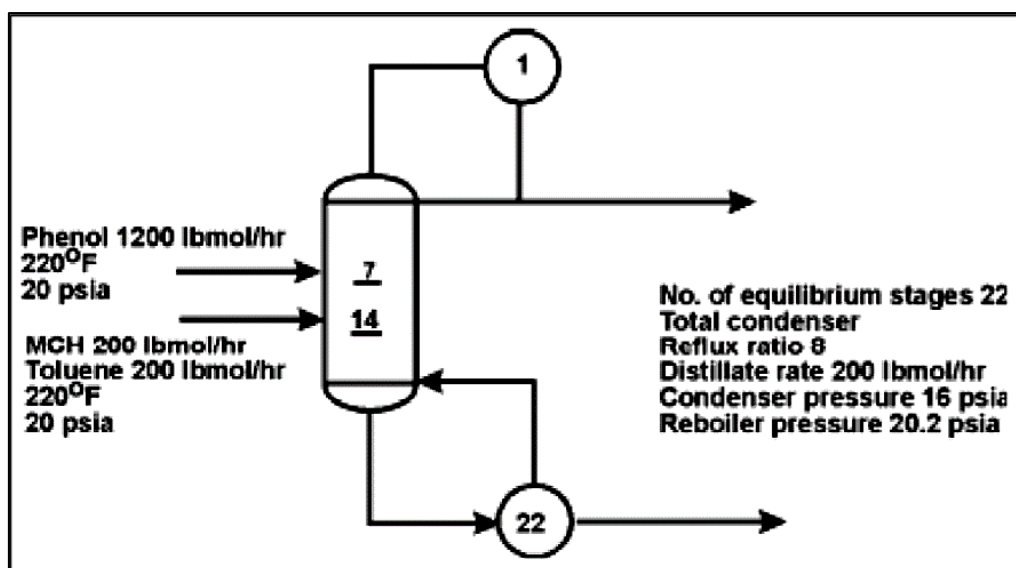
Este estudio se centra en la simulación de destilación extractiva para purificar el metilciclohexano con una pureza que supere el 95% en peso, que se basa en el proceso de destilación extractiva de una publicación de [2]. En la publicación, se aplicó la simulación de destilación extractiva del programa Aspen 9.0 para simular un proceso de separación de ciclopentano y 2,2-dimetilbutano utilizando el solvente DMF.

En este trabajo, el solvente que se utilizó fue el Fenol para purificar el metilciclohexano (MCH) con una pureza del 95 % en peso en una columna simulada por el software de ingeniería de procesos Aspen Plus v 10.

La mezcla MCH y tolueno forman un sistema de punto de ebullición cercano que es difícil de separar por destilación binaria simple. En la columna de recuperación de la Figura, el Fenol es usado para extraer el Tolueno, permitiendo recuperar methylcyclohexane relativamente puro en el producto del tope. La pureza del methylcyclohexane recuperado depende del flujo de entrada de fenol.

Figura 10

Diagrama de Flujo y condiciones de alimentación y operación.



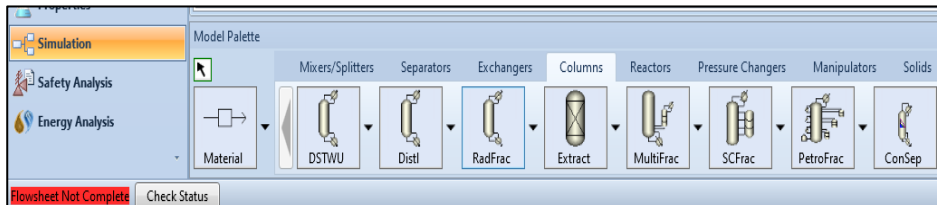
2.7.1. Planteamiento del modelo

El diseño riguroso de columnas de destilación es un proceso muy complicado y requiere mucho tiempo debido a la complejidad del cálculo y los muchos grados de libertad en el diseño. Estos incluyen la relación de reflujo, la temperatura y la presión de funcionamiento, la elección del condensador parcial o total, el uso de alimentaciones únicas o múltiples y su ubicación, la posibilidad de extraer algunas corrientes líquidas (llamadas corrientes laterales) de las etapas dentro de la columna (por ejemplo, en petróleo). refinación puede ser ventajoso tomar una corriente rica en componentes de rango medio que son menos volátiles que el producto destilado del condensado, pero más volátiles que el producto de fondo), el tipo de rehervidor, etc.

Aquí consideraremos solo una columna de destilación simple con una sola alimentación, el destilado y los fondos como únicas corrientes de producto, y el uso de un condensador total. El análisis abreviado es especialmente útil para proporcionar conjeturas iniciales sobre el número de etapas, la relación de reflujo y la ubicación de la alimentación, y se usará de esa manera aquí.

Haremos un cálculo de destilación riguroso utilizando el bloque RadFrac seleccionado en la pestaña Columnas en la Paleta del Modelos.

Figura 11
Selección del modelo Riguroso RadFrac



Elaboración propia

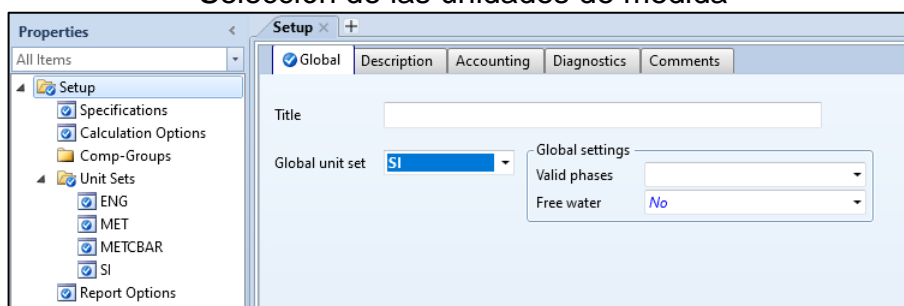
La documentación de Aspen Plus® describe a RadFrac como "fraccionamiento riguroso de 2 o 3 fases para columnas individuales". Es un programa de calificación para la destilación, no un programa de diseño para cumplir con las especificaciones de composición. Es decir, el usuario debe proporcionar todos los parámetros de la columna, como el número de etapas, la relación de reflujo, la ubicación de la etapa de alimentación, el tipo de condensador y el rehervidor, y luego RadFrac se usa para calcular los productos destilados y de fondo para esa configuración de destilación.

Si el objetivo es cumplir con ciertas especificaciones de pureza, es probable que se necesiten cálculos repetidos con diferentes parámetros de columna hasta que se cumplan las especificaciones de composición.

2.7.2. Inicialización de la simulación

Se asignó un título y se seleccionó como unidades básicas el Sistema Internacional (SI) a la simulación.

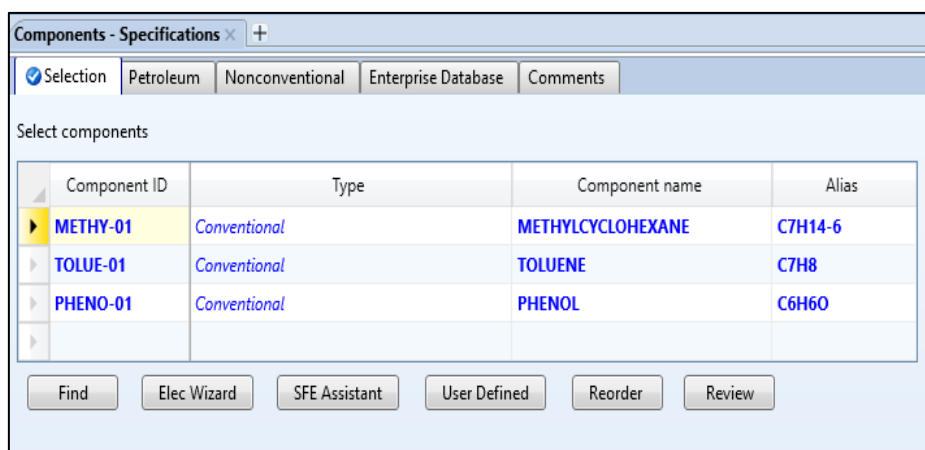
Figura 12
Selección de las unidades de medida



Elaboración propia

Seguidamente se especifican los componentes que intervienen en el proceso: Metilciclohexano (Methylcyclohexane), Tolueno (Toluene) y el Fenol (Phenol) de la base de datos del software.

Figura 13
Especificación de los componentes



Elaboración propia

El siguiente paso es definir el modelo termodinámico que predecirá el comportamiento de la mezcla y el solvente. Para ello en Métodos se hace clic, aquí se pueden utilizar varios modelos termodinámicos.

Para el sistema que estamos tratando recurrimos al “Asistente de Métodos” (Methods Assistant) basado en el árbol de decisiones de Eric Carlson [16] para definir el modelo termodinámico, de acuerdo a las siguientes figuras.

Figura 14
Selección del modelo termodinámico - 1


Property Method Selection Assistant

Welcome to the Property Method selection assistant.

The purpose of the assistant is to help you select the most appropriate property methods for use with Aspen Plus and Aspen Properties.


The assistant will ask you a number of questions which it uses to suggest one or more property methods to use.

Start by selecting one of the following options:

- Specify component type
- Specify process type 

Process type

Select the type of process or application:

- [Chemical](#) 
- Electrolyte
- Environmental
- Gas processing
- Mineral and metallurgical
- Oil and gas
- Petrochemical
- Polymer
- Power
- Refining
- Pharmaceuticals


Chemical processes

In general, an activity coefficient-based property method is appropriate, such as

For preliminary designs, one of the UNIFAC-based property methods: the original

At high pressures (>10 bars), use an equation of state method with advanced mixing rules: HYSGLYCO

Click one of the following options for more Help:


- [Azeotropic separations](#) 
- Carboxylic acids
- Hydrogen Fluoride (HF)
- Inorganic chemicals, e.g., caustics, acids
- Liquid phase reactions, e.g., esterification
- Phenol plant
- Refrigeration
- Help for equation of state methods with advanced mixing rules
- Help for liquid activity coefficient methods
- Help for liquid activity coefficient methods with different equation of state
- Help for UNIFAC methods

Chemical systems at low pressures

Use an activity coefficient method, such as NRTL, Wilson, UNIQUAC or UNIFAC.

For refrigerants, use REFPROP. For extremely accurate thermodynamic and transport

The following issues must also be considered

- Carboxylic acids (such as acetic acid) in the mixture
- Electrolyte system
- Henry's (non-condensable) components
- Hydrogen Fluoride (HF) in the mixture
- [Two liquid phases](#) 
- Help for liquid activity coefficient methods
- REFPROP property method


Two liquid phases

Use the NRTL or UNIQUAC methods and their variances

or

UNIF-LL, which is the UNIFAC method with special interaction parameters for LLE applications

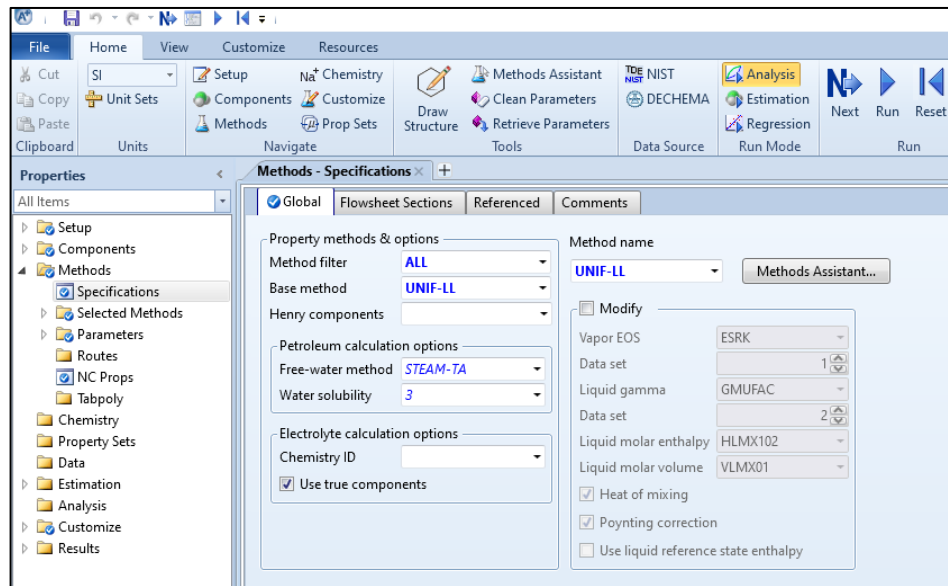
See the following Help topics for additional information:

- Liquid activity coefficient methods with different equation of state
- NRTL
- [UNIF-LL](#) 
- UNIQUAC

Elaboración propia

Según este procedimiento de caracterización del proceso que lleva a seleccionar el modelo UNIFAC-LL que es un modelo especial con interacción de parámetros para aplicaciones de equilibrio líquido-líquido.

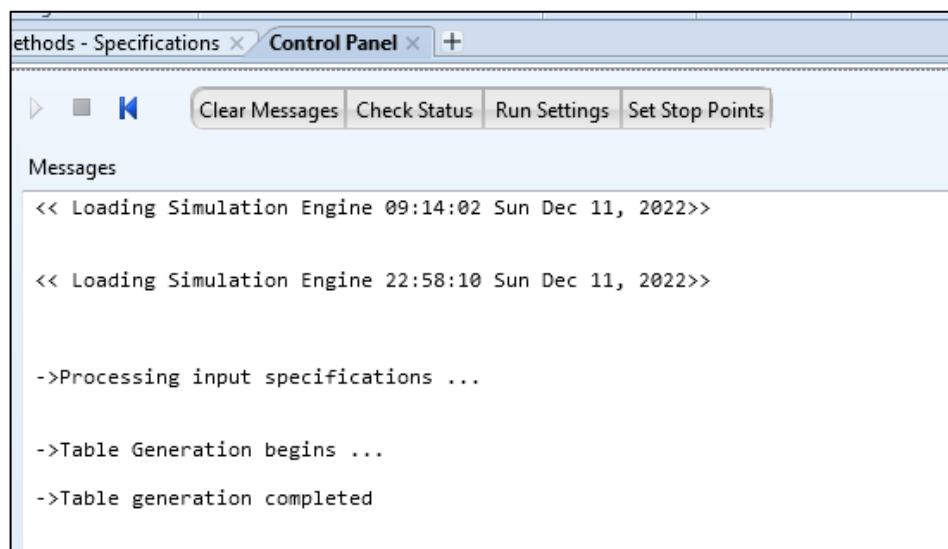
Figura 15
Selección del modelo termodinámico - 2



Elaboración propia

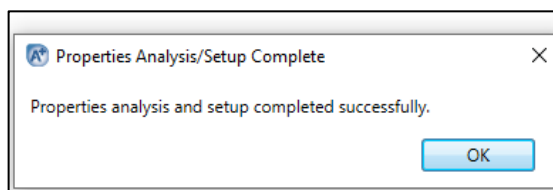
A continuación, se hace clic en el botón Next (N) de color azul con una flecha hacia la derecha surgiendo un cuadro indicando que los datos están completos y para continuar hacer clic en OK, obteniéndose un mensaje cargando todos los datos y generando el inicio de la simulación.

Figura 16
Simulación inicializada-1



Elaboración propia

Figura 17
Simulación inicializada-2



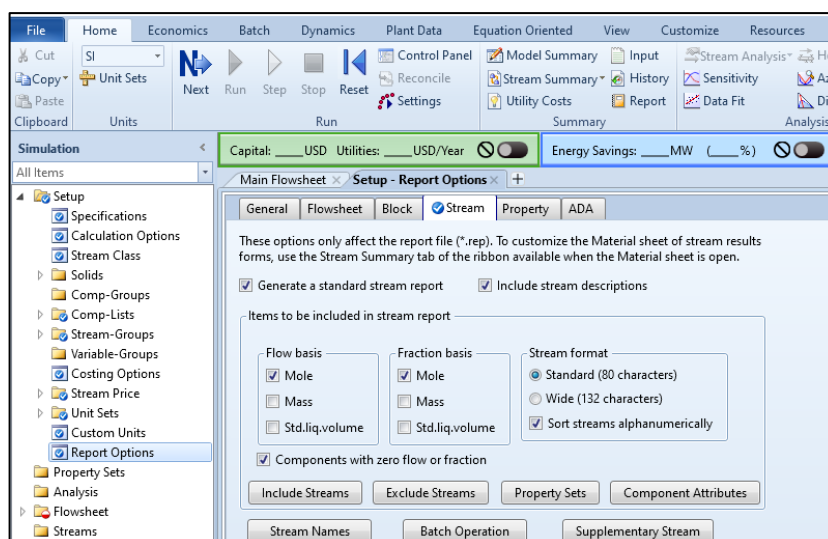
Elaboración propia

2.7.3. Construcción del Diagrama de Flujo

Como paso siguiente hacer clic en el botón iluminado “Simulación” en el Panel de navegación en la parte inferior izquierda para acceder a la ventana del Diagrama de flujo principal y a la Paleta de Modelos en la parte inferior de la ventana.

Es en esta ventana donde se ingresará un diagrama de flujo del proceso, es útil tener en cuenta que cuando se realizan cálculos que involucran mezclas, el valor predeterminado en Streams and Reports son las tasas de flujo másico y las tasas de flujo molar. A veces, el usuario también puede querer ver fracciones molares. Para asegurarse de que las fracciones molares aparezcan en los resultados de las corrientes de flujo del proceso en los cálculos de mezcla, haga clic en Setup>Report Options>Stream y luego, en Fraction basis hacer clic en Mol.

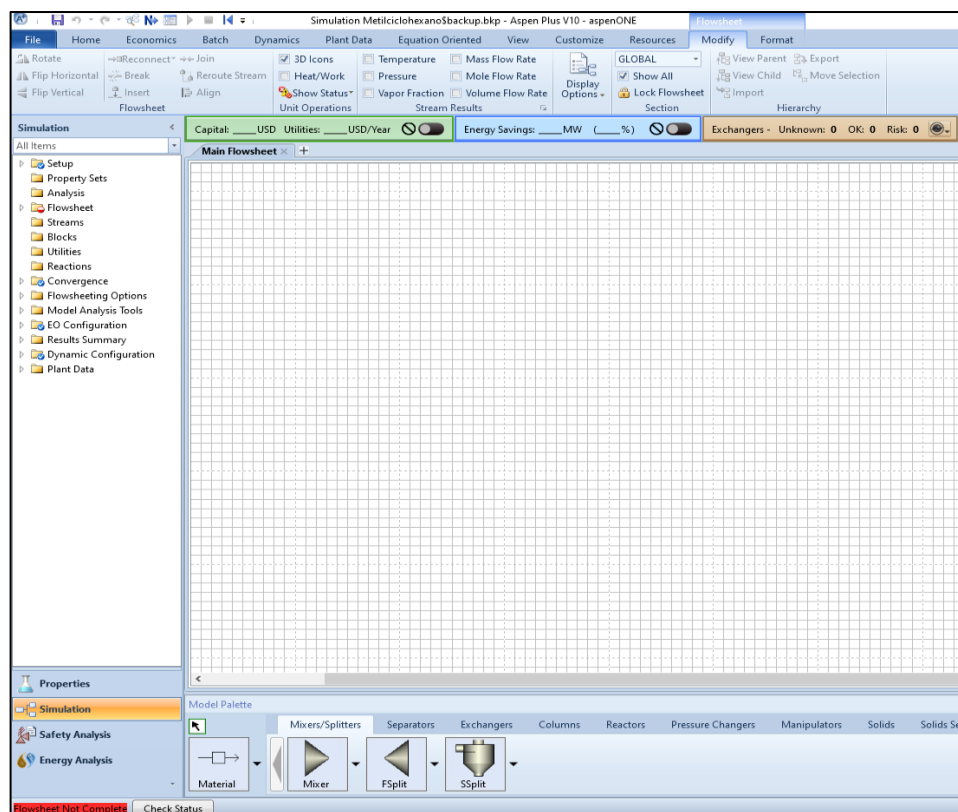
Figura 18
Configuración de los reportes de las corrientes



Elaboración propia

Se comienza abriendo la interfaz de usuario de Aspen Plus y después de haber elegido los componentes Metilciclohexano, Tolueno y Fenol y el modelo termodinámico UNIFAC-LL; a continuación, se construye el diagrama de flujo, seleccionando el botón “Simulation”, que abre una ventana de Diagrama de flujo principal en blanco con la Paleta de modelos en la parte inferior.

Figura 19
Ventana inicial de la simulación

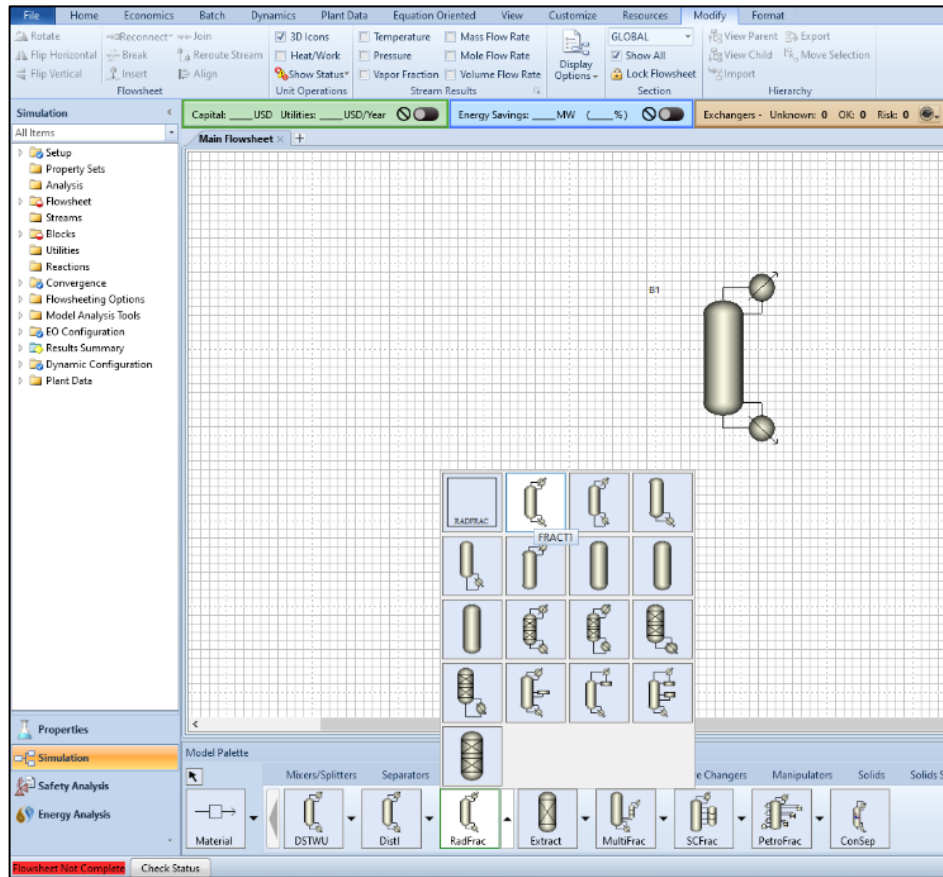


Elaboración propia

En esta tesis se simula la columna de destilación extractiva mediante la suite AspenONE®. La simulación de destilación extractiva utiliza el bloque Aspen Plus® RadFrac, que realiza cálculos rigurosos para columnas en aplicaciones de destilación ordinaria, absorción, desorción, destilación extractiva y azeotrópica, destilación en tres etapas y destilación reactiva; resuelve ecuaciones MESH, incluidas ecuaciones de balance de masa (M), relaciones de equilibrio (E), suma de composición (S) y balance de entalpía (H). La simulación de destilación

se realiza en estado estacionario, donde se analizan los flujos molares, composiciones y temperaturas.

Figura 20
Selección del modelo de destilación RadFrac



Elaboración propia

A continuación, se adicionan las corrientes de entrada y salida a la columna, se especifican las corrientes de alimentación y se establecen las condiciones de operación del procesamiento, según la tabla siguiente.

Tabla 1

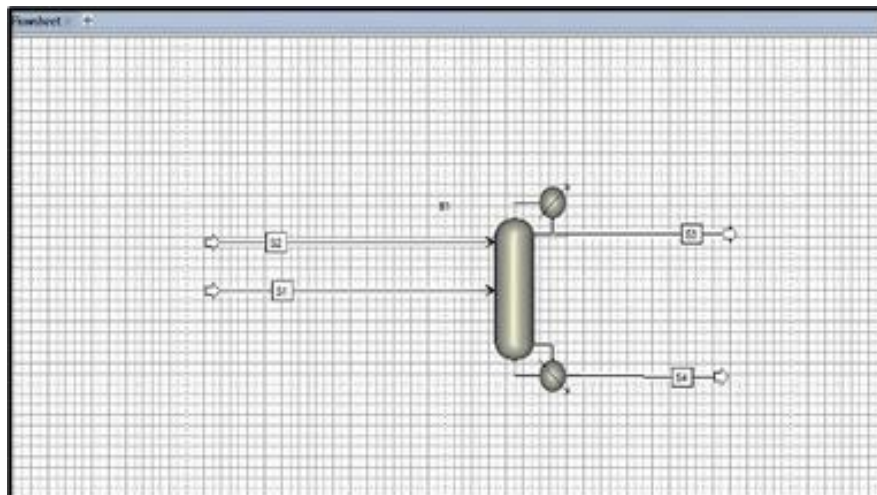
Condiciones de Operación y Alimentación

	ALIMENTACIÓN
Presión (P_F)	20 psia
Temperatura (T_F)	220°F
Flujo MCH (F_{MCH})	200 lbmol/h
Flujo Tolueno (F_{TOL})	200 lbmol/h
Flujo Fenol (F_{FENOL})	1200 lbmol/h
	CONDICIONES
N° etapas de equilibrio	22
Tipo Condensador	Total
Presión Condensador	16 psia
Presión Reboiler	20.2 psia
Relación Reflujo	8
Flujo Destilado	200 lbmol/h
Plato Alimentación MCH	14
Plato Alimentación Fenol	7

Elaboración propia

Figura 21

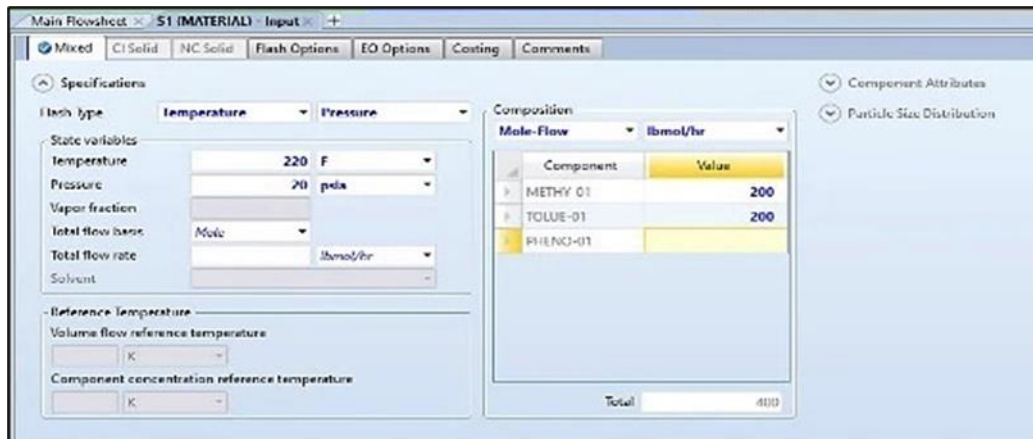
Construcción del Diagrama de Flujo



Elaboración propia

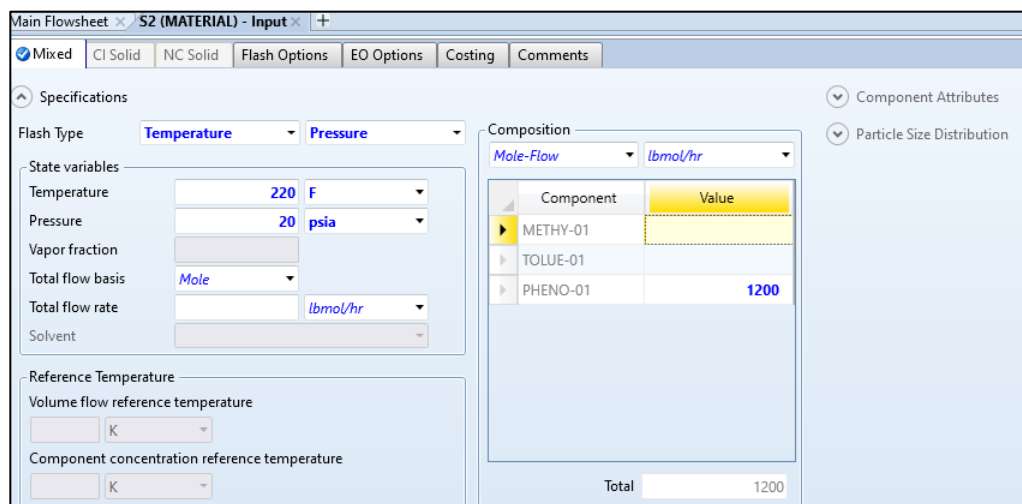
Haciendo clic en el botón azul “N” accedemos a las ventanas de especificación de las corrientes, donde se asignan los valores contenidos en la Tabla 1 y luego volver a dar clic en “N”.

Figura 22
Especificación de las corrientes de alimentación-1



Elaboración propia

Figura 23
Especificación de las corrientes de alimentación-2



Elaboración propia

Luego al hacer clic nuevamente en “N”, se accede a la ventana de la columna de destilación, donde se completan los datos de operación en las pestañas “Configuration”, “Streams” y “Pressure”.

Figura 24
Especificación de las condiciones de operación de la columna-1

Main Flowsheet × B1 Specifications - Setup × +

Configuration Streams Pressure Condenser Reboiler 3-Phase Comments

Setup options

Calculation type: Equilibrium

Number of stages: 22 [Stage Wizard]

Condenser: Total

Reboiler: Kettle

Valid phases: Vapor-Liquid

Convergence: Standard

Operating specifications

Distillate rate: Mole, 200 lbmol/hr

Reflux ratio: Mole, 8

Free water reflux ratio: 0 [Feed Basis]

Design and specify column internals

Elaboración propia

Figura 25
Especificación de las condiciones de operación de la columna-2

Main Flowsheet × B1 Specifications - Setup × +

Configuration Streams Pressure Condenser Reboiler 3-Phase Comments

Feed streams

Name	Stage	Convention
S1	14	Above-Stage
S2	7	Above-Stage

Product streams

Name	Stage	Phase	Basis	Flow	Units	Flow Ratio	Feed Specs
S3	1	Liquid	Mole		kmol/sec		Feed basis
S4	22	Liquid	Mole		kmol/sec		Feed basis

Pseudo streams

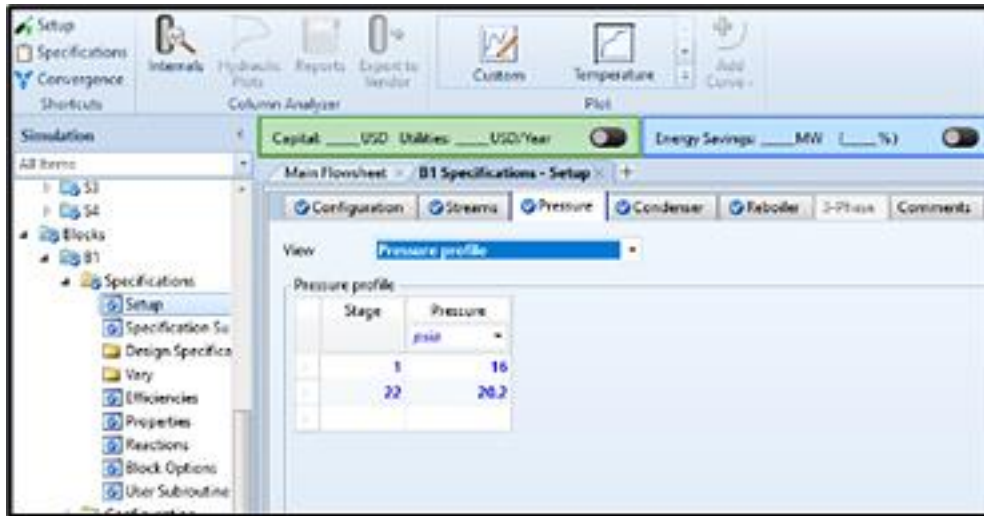
Name	Pseudo Stream Type	Stage	Internal Phase	Reboiler Phase	Reboiler Conditions	Pumparound ID	Pumparound Conditions	Flow	Units
------	--------------------	-------	----------------	----------------	---------------------	---------------	-----------------------	------	-------

Elaboración propia

Luego dirigirse a la pestaña Pressure para ingresar el perfil de presiones en la columna.

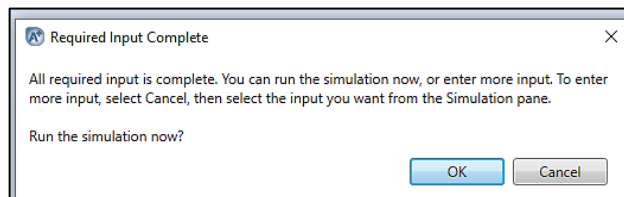
Figura 26

Especificación de las condiciones de operación de la columna-3



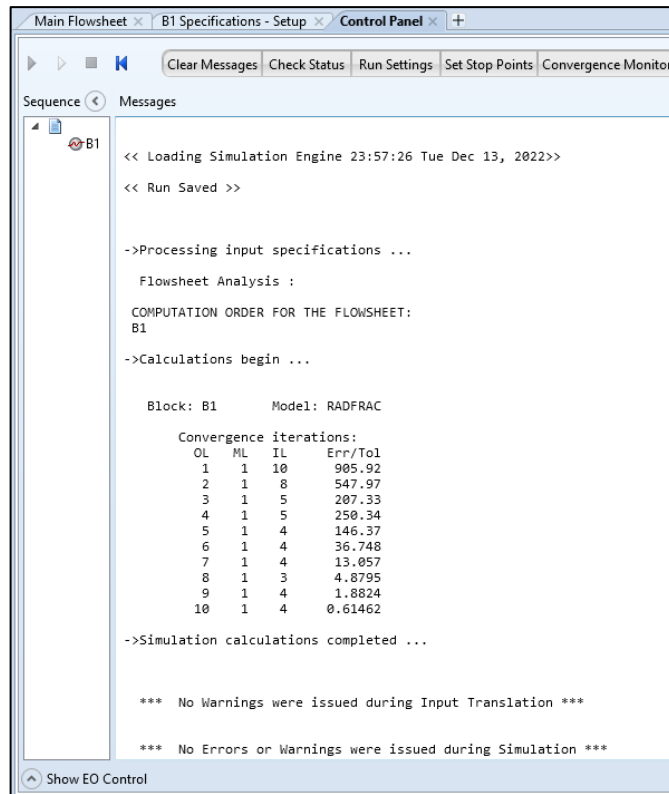
Elaboración propia

Al hacer clic en “N”, surge el mensaje de que todos los requerimientos han sido completados. Hacer clic en OK.



Aparece la pestaña de Panel de Control (Control Panel) del programa donde se observan los mensajes de la ejecución de la simulación y los resultados de la convergencia de las iteraciones del modelo.

Figura 27
Panel Control visualizando la ejecución de la simulación



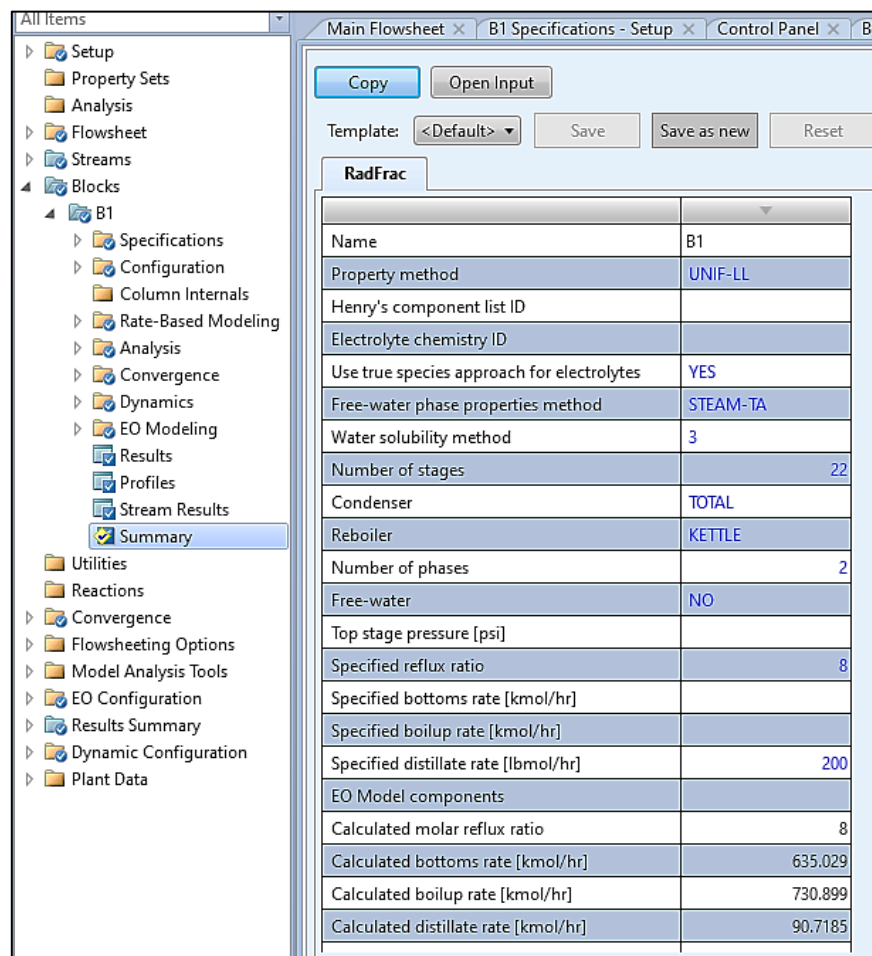
Elaboración propia

Los resultados de la simulación con el modelamiento de la alimentación, del paquete de propiedades y de la columna de destilación extractiva bajo el modelo riguroso RadFrac se presentan en el siguiente apartado (III) Resultados.

III. RESULTADOS

En el panel de navegación que está a la izquierda, hacer clic en “Blocks” para desplegar el block “B1” que es la columna de destilación extractiva simulada; hacer clic en “B1” para desplegar todas las opciones entre las que se selecciona “Summary”, donde se visualiza un resumen completo de toda la simulación con los datos suministrados.

Figura 28
Resumen de la corrida de simulación



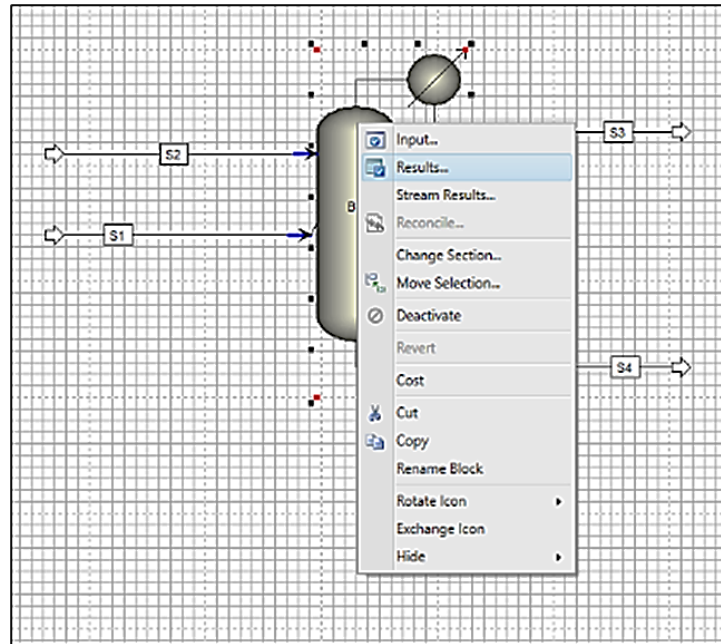
RadFrac	
Name	B1
Property method	UNIF-LL
Henry's component list ID	
Electrolyte chemistry ID	
Use true species approach for electrolytes	YES
Free-water phase properties method	STEAM-TA
Water solubility method	3
Number of stages	22
Condenser	TOTAL
Reboiler	KETTLE
Number of phases	2
Free-water	NO
Top stage pressure [psi]	
Specified reflux ratio	8
Specified bottoms rate [kmol/hr]	
Specified boilup rate [kmol/hr]	
Specified distillate rate [lbmol/hr]	200
EO Model components	
Calculated molar reflux ratio	8
Calculated bottoms rate [kmol/hr]	635.029
Calculated boilup rate [kmol/hr]	730.899
Calculated distillate rate [kmol/hr]	90.7185

Elaboración propia

Esta información es necesaria para diseñar otros equipos que reciban las corrientes de salida tales como intercambiadores de calor si se utiliza esta configuración de columna.

Para visualizar los resultados de la simulación bajo el modelo propuesto, se hace clic derecho en el ícono de la columna RadFrac del PFD y en el menú contextual que aparece se selecciona la opción “Results...”

Figura 29
Procedimiento para visualizar los resultados de la simulación



Elaboración propia

Se visualizan tres tipos de resultados en el panel de navegación: “Results”, “Profiles” y “Stream Results”.

En la ventana Results se observan los resultados de la columna de destilación extractiva RadFrac en tres pestañas Summary, Balance y Split Fraction. Seguidamente se presentan las figuras de los resultados de cada una de ellas en doble formato. En primer lugar, los resultados de Summary.

Tabla 2
Desempeño del Condensador/Etapa superior (Resumen)

Name	Value	Units
Temperature	103.463273	C
Subcooled temperature		
Heat duty	-1694919.23	cal/sec
Subcooled duty		
Distillate rate	90.718474	kmol/hr
Reflux rate	725.747792	kmol/hr
Reflux ratio	8	
Free water distillate rate		
Free water reflux ratio		
Distillate to feed ratio		

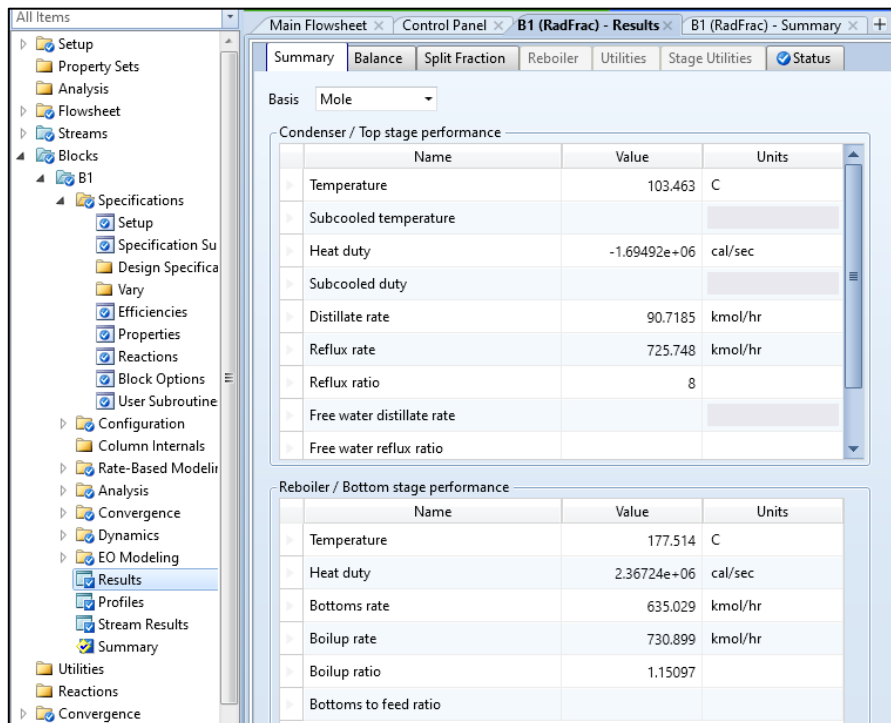
Elaboración propia

Tabla 3
Desempeño del Reboiler/Etapa Fondos (Resumen)

Name	Value	Units
Temperature	177.514262	C
Heat duty	2367243.36	cal/sec
Bottoms rate	635.029318	kmol/hr
Boilup rate	730.89882	kmol/hr
Boilup ratio	1.15096862	
Bottoms to feed ratio		

Elaboración propia

Figura 30
Resultado General de la simulación



Elaboración propia

Tabla 4
Balance Materia y Energía de la Columna

Total	Units	In	Out	Relative difference
Mole-flow	kmol/hr	725.747792	725.747792	0
Mass-flow	kg/hr	68493.0756	68493.0756	1.49E-15
Enthalpy	cal/sec	-5937384.75	-5265006.37	-0.113244874

Elaboración propia

Tabla 5

Fracción dividida en corrientes de producto

Component	S3	S4
METHY-01	0.97942806	0.02057194
TOLUE-01	1.96E-06	1
PHENO-01	0.00342833	0.99657167

Elaboración propia

Figura 31
Perfiles de Presión, Temperatura, Flujos y Entalpías (TPFQ)

Stage	Temperature C	Pressure bar	Heat duty cal/sec	Liquid from (Mole) kmol/hr	Vapor from (Mole) kmol/hr	Liquid feed (Mole) kmol/hr	Vapor feed (Mole) kmol/hr	Mixed feed (Mole) kmol/hr	Liquid product (Mole) kmol/hr	Vapor product (Mole) kmol/hr	Liquid enthalpy cal/mol	Vapor enthalpy cal/mol	Liquid flow (Mole) kmol/hr	Vapor flow (Mole) kmol/hr
1	103.463	1.10316	-1.69492e+...	816.466	0	0	0	0	90.7185	0	-41333.9	-33884.4	725.748	0
2	103.911	1.11695	0	725.936	816.466	0	0	0	0	0	-41302.9	-33861.4	725.936	816.466
3	104.353	1.13074	0	726.117	816.654	0	0	0	0	0	-41267.9	-33835.9	726.117	816.654
4	104.793	1.14453	0	725.428	816.835	0	0	0	0	0	-41221.1	-33804.8	725.428	816.835
5	105.241	1.15832	0	722.662	816.146	0	0	0	0	0	-41135.5	-33757.9	722.662	816.146
6	105.801	1.17211	0	699.415	813.381	0	0	0	0	0	-40863.4	-33656.3	699.415	813.381
7	109.231	1.1859	0	1304.24	790.133	544.311	0	0	0	0	-37367.1	-33195.2	1304.24	790.133
8	109.659	1.19969	0	1306.11	850.652	0	0	0	0	0	-37342.4	-33171.2	1306.11	850.652
9	110.087	1.21348	0	1307.9	852.517	0	0	0	0	0	-37308.7	-33142.6	1307.9	852.517
10	110.526	1.22727	0	1309.51	854.31	0	0	0	0	0	-37246.8	-33099.8	1309.51	854.31
11	111.002	1.24106	0	1310.58	855.915	0	0	0	0	0	-37100.1	-33013	1310.58	855.915
12	111.596	1.25485	0	1310.37	856.986	0	0	0	0	0	-36703.3	-32793.8	1310.37	856.986
13	112.502	1.26864	0	1311.32	856.779	0	0	0	0	0	-35635.4	-32186	1311.32	856.779
14	113.596	1.28242	0	1512.21	857.728	181.437	0	0	0	0	-33354.3	-30558.5	1512.21	857.728
15	114.059	1.29621	0	1513.83	877.178	0	0	0	0	0	-33206.5	-30452.8	1513.83	877.178
16	114.625	1.31	0	1514.35	878.804	0	0	0	0	0	-32841.5	-30203.6	1514.35	878.804
17	115.457	1.32379	0	1512.27	879.32	0	0	0	0	0	-31929.9	-29577.3	1512.27	879.32
18	116.959	1.33758	0	1502.01	877.24	0	0	0	0	0	-29771.3	-27996.8	1502.01	877.24
19	120.271	1.35137	0	1460.55	866.983	0	0	0	0	0	-25408.2	-24210.5	1460.55	866.983
20	130.037	1.36516	0	1372.8	825.525	0	0	0	0	0	-20127.9	-16215.5	1372.8	825.525
21	154.188	1.37895	0	1365.93	737.773	0	0	0	0	0	-20143.4	-5291.59	1365.93	737.773

Elaboración Propia

Tabla 6
Perfiles de Presión, Temperatura, Flujos y Entalpías (TPFQ)

Stage	Temperature	Pressure	Heat duty	Liquid from (Mole)	Vapor from (Mole)	Liquid feed (Mole)	Vapor feed (Mole)	Mixed feed (Mole)	Liquid product (Mole)	Vapor product (Mole)	Liquid enthalpy	Vapor enthalpy	Liquid flow (Mole)	Vapor flow (Mole)
	C	bar	cal/sec	kmol/hr	kmol/hr	kmol/hr	kmol/hr	kmol/hr	kmol/hr	kmol/hr	cal/mol	cal/mol	kmol/hr	kmol/hr
1	103.463	1.10316	-1.69E+06	816.466	0	0	0	0	90.7185	0	-41333.9	-33884.4	725.748	0
2	103.911	1.11695	0	725.936	816.466	0	0	0	0	0	-41302.9	-33861.4	725.936	816.466
3	104.353	1.13074	0	726.117	816.654	0	0	0	0	0	-41267.9	-33835.9	726.117	816.654
4	104.793	1.14453	0	725.428	816.835	0	0	0	0	0	-41221.1	-33804.8	725.428	816.835
5	105.241	1.15832	0	722.662	816.146	0	0	0	0	0	-41135.5	-33757.9	722.662	816.146
6	105.801	1.17211	0	699.415	813.381	0	0	0	0	0	-40863.4	-33656.3	699.415	813.381
7	109.231	1.1859	0	1304.24	790.133	544.311	0	0	0	0	-37367.1	-33195.2	1304.24	790.133
8	109.659	1.19969	0	1306.11	850.652	0	0	0	0	0	-37342.4	-33171.2	1306.11	850.652
9	110.087	1.21348	0	1307.9	852.517	0	0	0	0	0	-37308.7	-33142.6	1307.9	852.517
10	110.526	1.22727	0	1309.51	854.31	0	0	0	0	0	-37246.8	-33099.8	1309.51	854.31
11	111.002	1.24106	0	1310.58	855.915	0	0	0	0	0	-37100.1	-33013	1310.58	855.915
12	111.596	1.25485	0	1310.37	856.986	0	0	0	0	0	-36703.3	-32793.8	1310.37	856.986
13	112.502	1.26864	0	1311.32	856.779	0	0	0	0	0	-35635.4	-32186	1311.32	856.779
14	113.596	1.28242	0	1512.21	857.728	181.437	0	0	0	0	-33354.3	-30558.5	1512.21	857.728
15	114.059	1.29621	0	1513.83	877.178	0	0	0	0	0	-33206.5	-30452.8	1513.83	877.178
16	114.625	1.31	0	1514.35	878.804	0	0	0	0	0	-32841.5	-30203.6	1514.35	878.804
17	115.457	1.32379	0	1512.27	879.32	0	0	0	0	0	-31929.9	-29577.3	1512.27	879.32
18	116.959	1.33758	0	1502.01	877.24	0	0	0	0	0	-29771.3	-27996.8	1502.01	877.24
19	120.271	1.35137	0	1460.55	866.983	0	0	0	0	0	-25408.2	-24210.5	1460.55	866.983
20	130.037	1.36516	0	1372.8	825.525	0	0	0	0	0	-20127.9	-16215.5	1372.8	825.525
21	154.188	1.37895	0	1365.93	737.773	0	0	0	0	0	-20143.4	-5291.59	1365.93	737.773
22	177.514	1.39274	2.37E+06	635.029	730.899	0	0	0	635.029	0	-23942.6	-5183.51	635.029	730.899

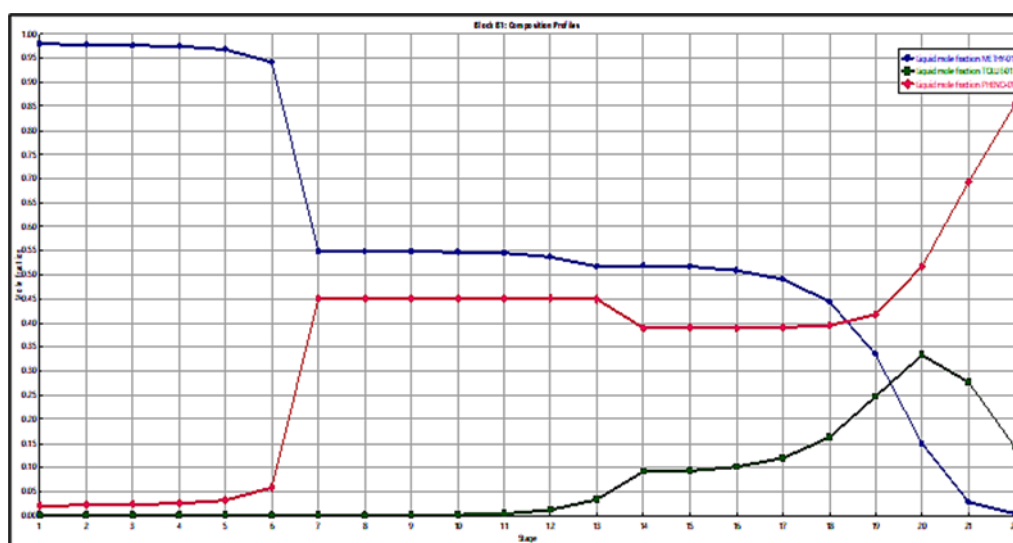
Elaboración Propia

Tabla 7
Composiciones molares de líquidos por etapa (TPFQ)

Stage	METHY-01	TOLUE-01	PHENO-01
1	0.979428	1.96E-06	0.02057
2	0.978753	3.34E-06	0.0212441
3	0.977605	5.47E-06	0.0223897
4	0.975137	8.81E-06	0.0248546
5	0.968422	1.43E-05	0.0315633
6	0.941182	2.43E-05	0.0587935
7	0.54833	4.36E-05	0.451626
8	0.548571	0.00013445	0.451295
9	0.548599	0.00041254	0.450989
10	0.547989	0.0012612	0.45075
11	0.545474	0.00383409	0.450692
12	0.537514	0.0115085	0.450977
13	0.517579	0.0334512	0.448969
14	0.519147	0.0906562	0.390197
15	0.516704	0.0932967	0.39
16	0.509605	0.100388	0.390006
17	0.490744	0.118683	0.390573
18	0.44367	0.162203	0.394127
19	0.33531	0.247405	0.417284
20	0.149855	0.333167	0.516978
21	0.028902	0.277752	0.693346
22	0.00293885	0.142857	0.854204

Elaboración Propia

Figura 32
Perfil de Composición molar Líquidos (TPFQ)



Elaboración Propia

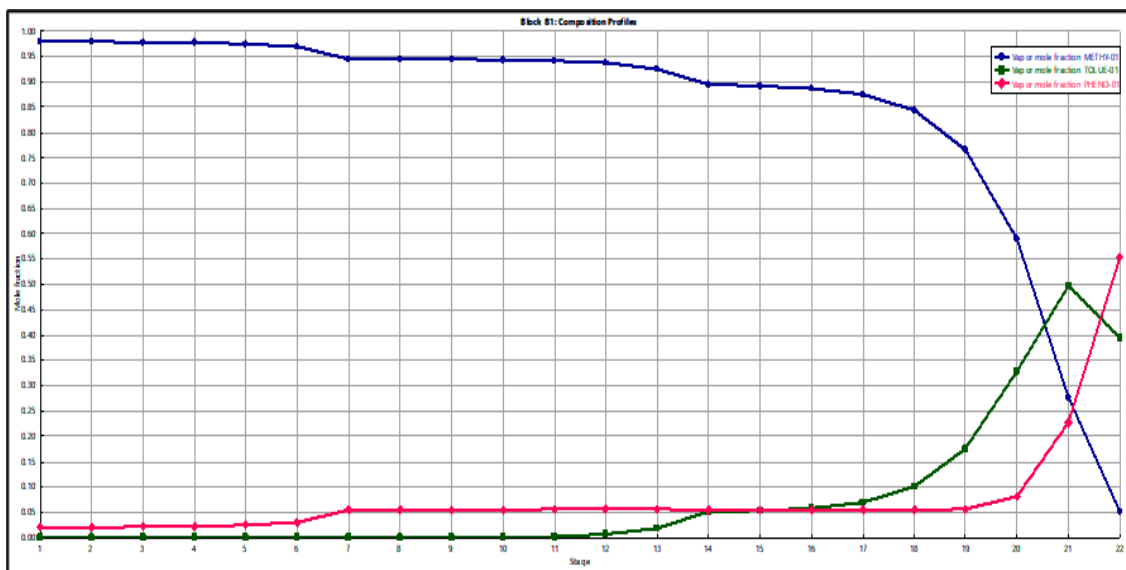
Azul = Metilciclohexano; Rojo = Fenol; Verde = Tolueno

Tabla 8
Composiciones molares de vapor por etapa (TPFQ)

Stage	METHY-01	TOLUE-01	PHENO-01
1	0.980648	1.08E-06	0.0193513
2	0.980265	1.84E-06	0.0197331
3	0.979689	3.00E-06	0.0203084
4	0.978709	4.77E-06	0.0212864
5	0.976602	7.56E-06	0.0233902
6	0.970873	1.21E-05	0.0291148
7	0.947715	2.05E-05	0.052265
8	0.947325	6.31E-05	0.0526122
9	0.946847	0.00019394	0.0529592
10	0.946095	0.00059426	0.0533106
11	0.944508	0.00181535	0.0536769
12	0.940403	0.00551736	0.0540799
13	0.928978	0.0165743	0.0544477
14	0.899731	0.0482516	0.0520174
15	0.897799	0.0498845	0.0523167
16	0.893138	0.0542585	0.0526033
17	0.881299	0.0658568	0.0528441
18	0.851109	0.0957662	0.0531243
19	0.776769	0.167729	0.055502
20	0.605246	0.31506	0.0796943
21	0.287831	0.485806	0.226363
22	0.0540147	0.389028	0.556957

Elaboración Propia

Figura 33
Perfil de Composición molar Vapor (TPFQ)



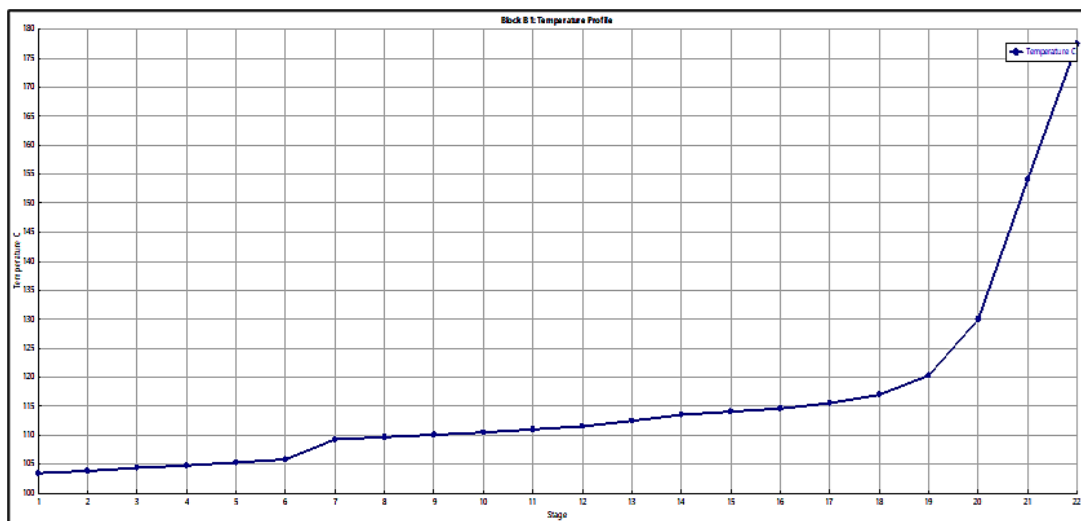
Elaboración Propia

Tabla 9
Perfil de Temperatura, Heat duty y Entalpías (TPFQ)

Stage	Temperature C	Heat duty cal/sec	Liquid enthalpy cal/mol	Vapor enthalpy cal/mol
1	103.463	-1.69E+06	-41333.9	-33884.4
2	103.911	0	-41302.9	-33861.4
3	104.353	0	-41267.9	-33835.9
4	104.793	0	-41221.1	-33804.8
5	105.241	0	-41135.5	-33757.9
6	105.801	0	-40863.4	-33656.3
7	109.231	0	-37367.1	-33195.2
8	109.659	0	-37342.4	-33171.2
9	110.087	0	-37308.7	-33142.6
10	110.526	0	-37246.8	-33099.8
11	111.002	0	-37100.1	-33013
12	111.596	0	-36703.3	-32793.8
13	112.502	0	-35635.4	-32186
14	113.596	0	-33354.3	-30558.5
15	114.059	0	-33206.5	-30452.8
16	114.625	0	-32841.5	-30203.6
17	115.457	0	-31929.9	-29577.3
18	116.959	0	-29771.3	-27996.8
19	120.271	0	-25408.2	-24210.5
20	130.037	0	-20127.9	-16215.5
21	154.188	0	-20143.4	-5291.59
22	177.514	2.37E+06	-23942.6	-5183.51

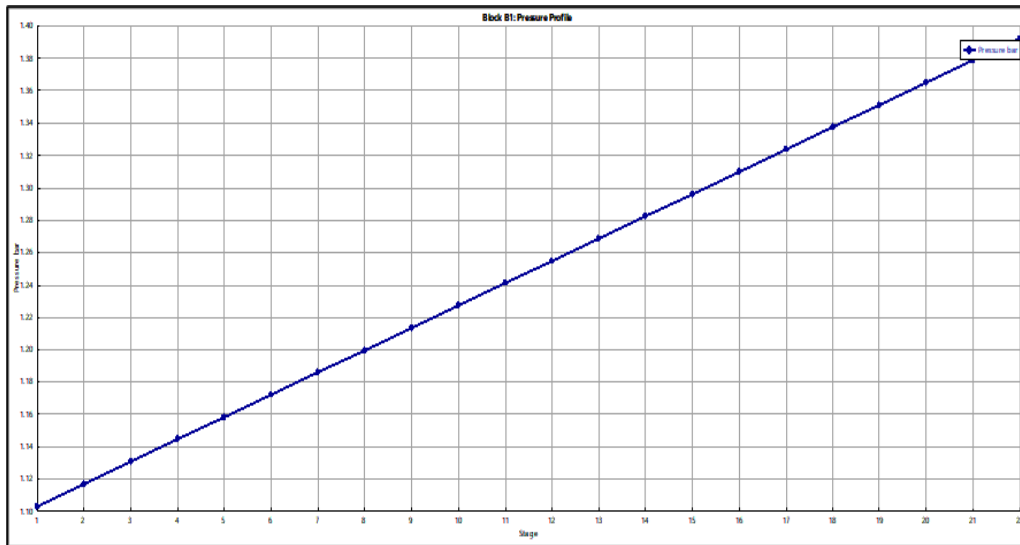
Elaboración Propia

Figura 34
Perfil de Temperatura (TPFQ)



Elaboración Propia

Figura 35
Perfil de Presión (TPFQ)



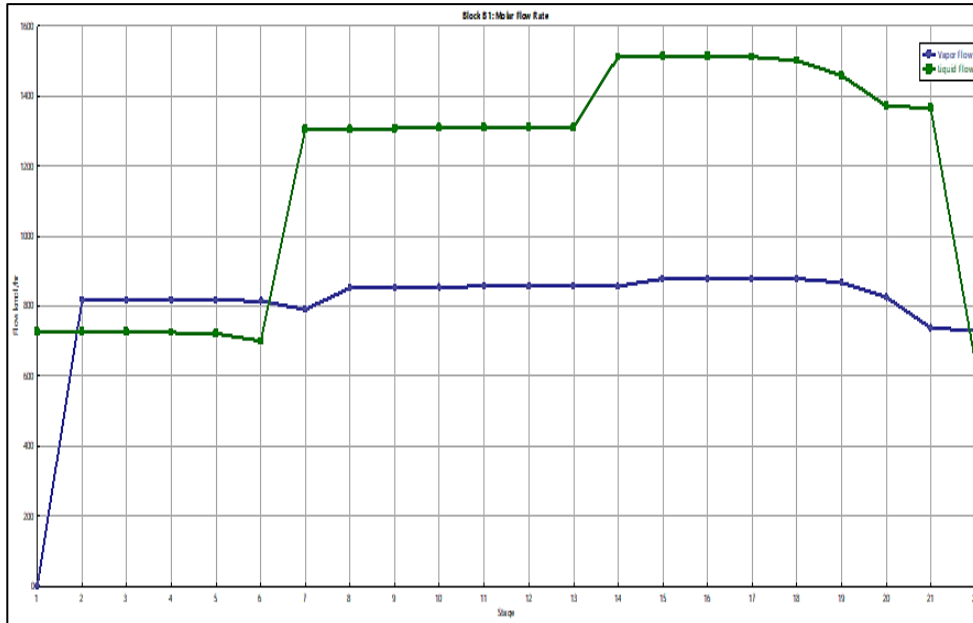
Elaboración Propia

Tabla 10
Perfil de Temperatura y Flujos por etapas (TPFQ)

Stage	Temperature C	Liquid from (Mole) kmol/hr	Vapor from (Mole) kmol/hr
1	103.463	816.466	0
2	103.911	725.936	816.466
3	104.353	726.117	816.654
4	104.793	725.428	816.835
5	105.241	722.662	816.146
6	105.801	699.415	813.381
7	109.231	1304.24	790.133
8	109.659	1306.11	850.652
9	110.087	1307.9	852.517
10	110.526	1309.51	854.31
11	111.002	1310.58	855.915
12	111.596	1310.37	856.986
13	112.502	1311.32	856.779
14	113.596	1512.21	857.728
15	114.059	1513.83	877.178
16	114.625	1514.35	878.804
17	115.457	1512.27	879.32
18	116.959	1502.01	877.24
19	120.271	1460.55	866.983
20	130.037	1372.8	825.525
21	154.188	1365.93	737.773
22	177.514	635.029	730.899

Elaboración Propia

Figura 36
Perfil de Flujos por etapas (TPFQ)



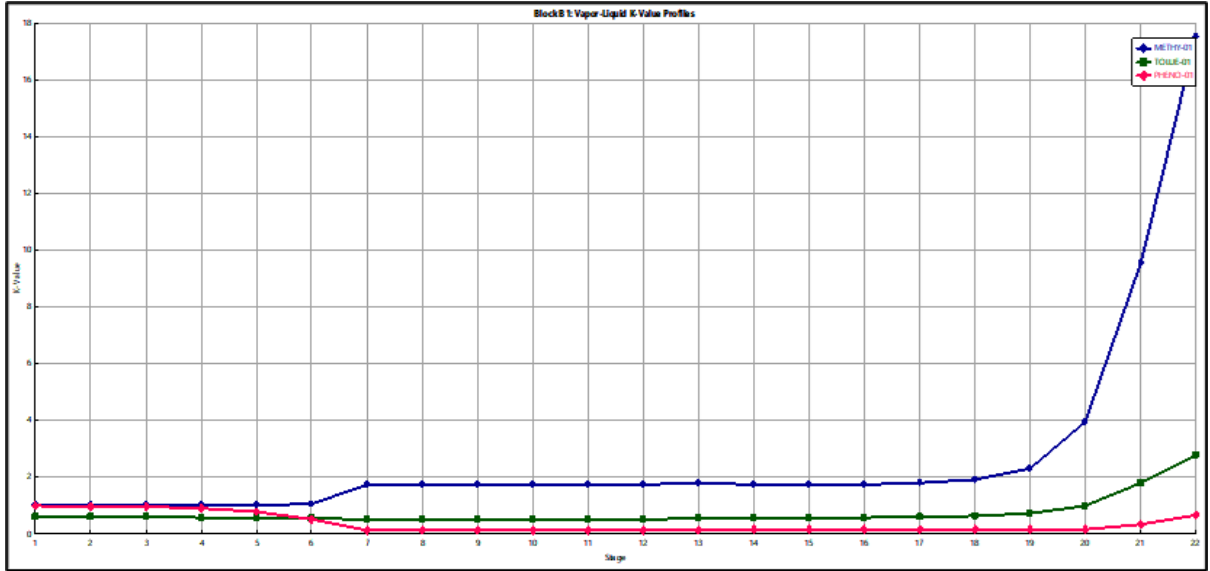
Elaboración Propia

Tabla 11
Valores K Vapor-Líquido por etapa de equilibrio

Stage	METHY-01	TOLUE-01	PHENO-01
1	1.00039	0.586948	0.980908
2	1.00072	0.585632	0.968406
3	1.0013	0.582919	0.944347
4	1.00277	0.576805	0.891984
5	1.00738	0.562651	0.773265
6	1.03024	0.531533	0.516034
7	1.72453	0.498569	0.12046
8	1.723	0.499128	0.121349
9	1.72198	0.499819	0.122231
10	1.72244	0.50093	0.123103
11	1.72731	0.503319	0.123953
12	1.7448	0.509503	0.124774
13	1.78863	0.526192	0.126096
14	1.72367	0.564132	0.138345
15	1.72784	0.566649	0.139202
16	1.74229	0.572626	0.139922
17	1.78376	0.587435	0.140264
18	1.90105	0.623779	0.139505
19	2.28473	0.712841	0.136987
20	3.94465	0.984074	0.157025
21	9.56028	1.78923	0.326991
22	17.51	2.76466	0.648079

Elaboración Propia

Figura 37
Perfil de Valores-K Vapor-Líquido



Elaboración Propia

Figura 38
Resultado General de las corrientes

Material	Heat	Load	Vol.% Curves	Wt. % Curves	Petroleum	Polymers	Solids
Units: S1 S2 S3 S4							
Description							
From					B1	B1	B1
To					B1	B1	B1
Stream Class					CONVEN	CONVEN	CONVEN
Maximum Relative Error							
Cost Flow		\$/hr					
MIXED Substream							
Phase					Liquid Phase	Liquid Phase	Liquid Phase
Temperature	C				104.444	104.444	103.463
Pressure	bar				1.37895	1.37895	1.10316
Molar Vapor Fraction					0	0	0
Molar Liquid Fraction					1	1	1
Molar Solid Fraction					0	0	0
Mass Vapor Fraction					0	0	0
Mass Liquid Fraction					1	1	1
Mass Solid Fraction					0	0	0
Molar Enthalpy	cal/mol				-17680.8	-33375.5	-41333.9
Mass Enthalpy	cal/gm				-185.793	-354.632	-421.326
Molar Entropy	cal/mol-K				-113.233	-72.4045	-155.308
Mass Entropy	cal/gm-K				-1.18986	-0.769335	-1.58309
Molar Density	mol/cc				0.00774608	0.0107205	0.00712504
Mass Density	gm/cc				0.737151	1.00894	0.698997
Enthalpy Flow	cal/sec				-891099	-5.04629e+06	-1.0416e+06
Average MW					95.1643	94.113	98.1043

Elaboración Propia

Tabla 12

Balance de Materia y Energía en corrientes de entrada y salida

Description					
From				B1	B1
To		B1	B1		
Stream Class		CONVEN	CONVEN	CONVEN	CONVEN
Phase		Liquid Phase	Liquid Phase	Liquid Phase	Liquid Phase
Temperature	C	104.4444444	104.4444444	103.4632734	177.5142617
Pressure	bar	1.378951459	1.378951459	1.103161167	1.392740973
Molar Vapor Fraction		0	0	0	0
Molar Liquid Fraction		1	1	1	1
Molar Solid Fraction		0	0	0	0
Mass Vapor Fraction		0	0	0	0
Mass Liquid Fraction		1	1	1	1
Mass Solid Fraction		0	0	0	0
Molar Enthalpy	cal/mol	-17680.83375	-33375.46697	-41333.86854	-23942.63858
Mass Enthalpy	cal/gm	-185.7926378	-354.6316958	-421.325659	-255.1344306
Molar Entropy	cal/mol-K	-113.2325504	-72.40446338	-155.3076884	-62.50765787
Mass Entropy	cal/gm-K	-1.189863245	-0.769335082	-1.583087103	-0.666085972
Molar Density	mol/cc	0.007746085	0.010720499	0.007125037	0.00952104
Mass Density	gm/cc	0.737151047	1.008938705	0.69899693	0.893485163
Enthalpy Flow	cal/sec	-891099.0318	-5046285.722	-1041595.966	-4223410.402
Average MW		95.16434	94.11304	98.10432299	93.84322814
Mole Flows	kmol/hr	181.436948	544.310844	90.718474	635.029318
METHY-01	kmol/hr	90.718474	0	88.85221858	1.866255416
TOLUE-01	kmol/hr	90.718474	0	0.000177648	90.71829635
PHENO-01	kmol/hr	0	544.310844	1.866077768	542.4447662
Mole Fractions					
METHY-01		0.5	0	0.979428055	0.002938849
TOLUE-01		0.5	0	1.96E-06	0.142856863
PHENO-01		0	1	0.020569986	0.854204288
Mass Flows	kg/hr	17266.32741	51226.74823	8899.874475	59593.20117
METHY-01	kg/hr	8907.48004	0	8724.235855	183.2441854
TOLUE-01	kg/hr	8358.847368	0	0.016368536	8358.830999
PHENO-01	kg/hr	0	51226.74823	175.6222516	51051.12598
Mass Fractions					
METHY-01		0.515887359	0	0.980265045	0.003074918
TOLUE-01		0.484112641	0	1.84E-06	0.140264843
PHENO-01		0	1	0.019733116	0.856660239
Volume Flow	l/min	390.3842021	846.2150708	212.205855	1111.624525

Elaboración Propia

IV. DISCUSIÓN

En primer lugar, se abordará la influencia del modelamiento y simulación para lograr mejores rendimientos en la purificación del metilciclohexano.

A la luz de los resultados obtenidos podemos observar que la simulación de procesos le permite predecir el comportamiento de un proceso mediante el uso de relaciones básicas de ingeniería, como balances de masa y energía, y equilibrio químico y de fases.

Con datos termodinámicos confiables, condiciones operativas realistas y modelos rigurosos de equipos, puede simular el comportamiento real del proceso y/o de la planta. La simulación de procesos permitió ejecutar el caso de la purificación del metilciclohexano en mezcla con un azeótropo como el tolueno y separarlos mediante la adición de un extractor como el Fenol; también mediante esta técnica se pueden realizar análisis hipotéticos y realizar estudios de sensibilidad y ejecuciones de optimización. En este caso se modelaron las corrientes de alimentación de acuerdo a casos reales que se presentan tanto en la industria como en la enseñanza académica.

Por otro lado se modeló y ensayó la operación de destilación extractiva mediante el modelo de columna RadFrac-1 de la paleta de modelos de software Aspen Plus y en general con la simulación, se puede diseñar mejores plantas y aumentar la rentabilidad de las plantas existentes.

Un proceso consiste en componentes que se mezclan, separan, calientan, enfrían y se convierten mediante operaciones unitarias. Estos componentes se transfieren de una unidad a otra a través de flujos de proceso. Se puede reproducir un proceso real a un modelo de simulación de procesos de Aspen Plus siguiendo los siguientes pasos:

1) Definir la configuración del diagrama de flujo del proceso.

Se siguieron los pasos:

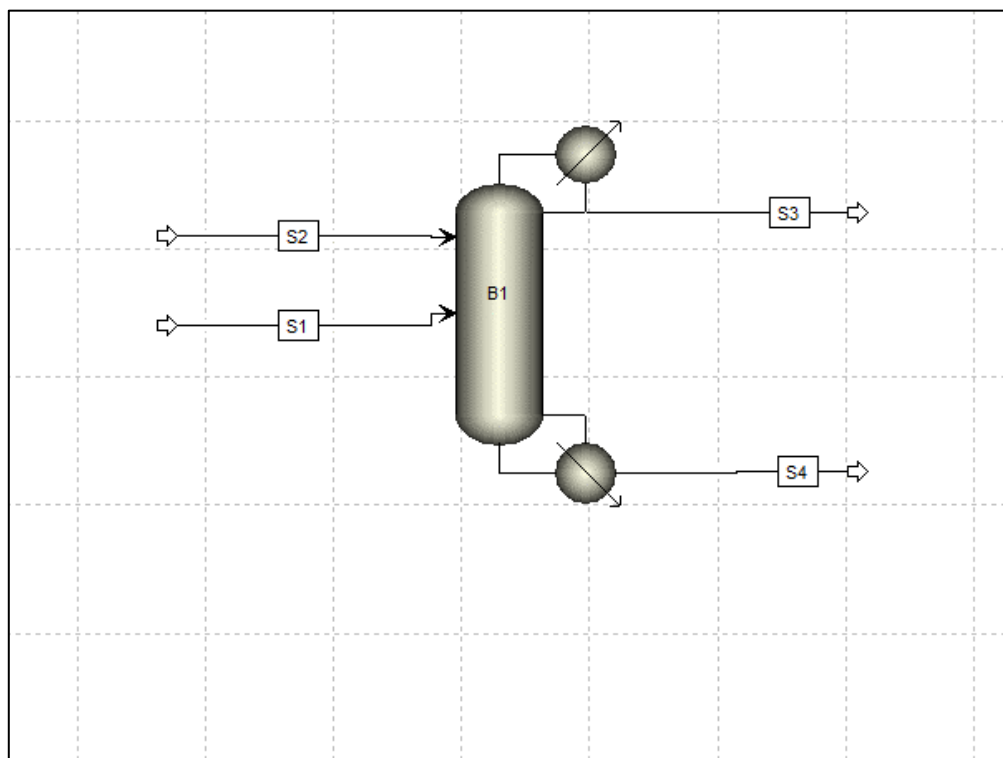
- Definición de las operaciones unitarias en el proceso
- Definición de los flujos de proceso que fluyen entre las operaciones.
- Selección de modelos de operación unitaria desde la biblioteca de modelos de Aspen Plus.

2) Especificación de componentes químicos del proceso.

Se tomaron los componentes de los bancos de datos de Aspen Plus o puede definirlos.

- 3) **Selección de modelos termodinámicos** apropiados de los disponibles en Aspen Plus, para representar las propiedades físicas de los componentes y mezclas en el proceso.
- 4) **Especificación de los caudales de los componentes** y las condiciones termodinámicas (por ejemplo, temperatura y presión) de las corrientes de alimentación al proceso.
- 5) **Especificación de las condiciones operativas** para las operaciones unitarias en el diagrama de flujo.

Figura 39
PFD de los modelos de la simulación



Elaboración Propia

Con respecto a la termodinámica el software permite seleccionar el modelo de paquete de propiedades mediante un Asistente de Métodos basado en el árbol de decisiones del Ing. Eric Carlson [16], en virtud de la identificación y especificación del proceso y/o los componentes. Según este asistente los modelos que mejor explican el proceso de separación de los azeótropos del metilciclohexano y el tolueno adicionando fenol es el UNIF-LL, que es el

método UNIFAC con parámetros de interacción especiales para aplicaciones LLE, tal como se observa en las Figuras 14 y 15.

A continuación, se muestran los resultados comparativos de las corridas declarando los modelos primero con UNIFAC y luego con UNIF-LL

Tabla 13
Comparación de los modelos termodinámicos

Modelo UNIFAC			Modelo UNIF-LL		
Component	S3	S4	Component	S3	S4
METHY-01	97%	3%	METHY-01	98%	2%
TOLUE-01	3%	97%	TOLUE-01	0%	100%
PHENO-01	0%	100%	PHENO-01	0%	100%

Elaboración Propia

Con el modelo UNIFAC se logra una purificación del 97% en la corriente S3 (Destilado) mientras que el tolueno se encuentra en los fondos de la columna en un 97% mezclado con el Fenol que llega al 100%.

Con el modelo UNIF-LL se logra recuperar hasta el 98% de metilciclohexano en el destilado mientras que en los fondos se logra el 100% de Tolueno y Fenol. Por esta razón se prefiere el modelo UNIF-LL que se utilizó en la ejecución de la simulación de la destilación extractiva para poder predecir la purificación del metilciclohexano.

V. CONCLUSIONES

- ✓ La recuperación de metilciclohexano (MCH) de su mezcla con tolueno usando fenol como solvente se simuló en el software de diagrama de flujo Aspen Plus para generar datos para la identificación del modelo.
- ✓ La simulación de estado estacionario se realizó utilizando Aspen Plus para medir el efecto de las variables de entrada sobre las variables de salida. Las variables de entrada consideradas son el caudal de reflujo y el trabajo térmico del condensador, mientras que las variables de salida consideradas son la fracción molar de metilciclohexano (MCH) (producto superior) y la fracción molar de tolueno (producto inferior).
- ✓ Para demostrar que el modelo seleccionado representa adecuadamente los sistemas, se compararon los resultados obtenidos para flujos molares, composición y temperaturas en este trabajo con los correspondientes ofrecidos por la literatura consultada.
- ✓ Mediante el software aspen Plus se modeló y seleccionó el modelo termodinámico que gobierna el proceso.
- ✓ De acuerdo a la conclusión anterior se concluye que el modelo predice la pureza del metilciclohexano en el destilado.
- ✓ De la misma manera el modelo determina el calor transferido óptimo en la destilación extractiva.

VI. RECOMENDACIONES

Se considera plantear las siguientes recomendaciones:

- Se recomienda realizar un estudio sobre la recuperación del fenol para ser recirculado en el proceso de destilación extractiva.
- Se recomienda realizar investigaciones de nuevas estructuras de proceso, a saber, destilación extractiva de calor integrado, columna de pared dividida extractiva o procesos que fusionan un preconcentrador con la columna de regeneración extractiva o de arrastre.
- También se recomienda realizar el estudio de optimización del proceso extractivo que considere sistemáticamente la columna extractiva junto con la columna de regeneración del arrastrador porque esta última requiere mucha energía y puede limitar la pureza del producto y el rendimiento en la columna extractiva.
- Realizar trabajos de investigación futuros que se dirijan hacia nuevos agentes de arrastre poco comunes como líquidos iónicos o agentes de arrastre eutécticos profundos, que deberían obedecer las reglas de viabilidad conocidas; y con la implementación práctica de configuraciones de ahorro de energía.
- Para realizar estos estudios recomendados es necesario poner a disposición de los tesisistas y docentes investigadores el software adecuado como el AspenOne.

VII. REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- [1] M. Akram y M. Usman, «Simulation and optimization of hydrogen fueled mobile power plant based on methylcyclohexane–toluene–hydrogen cycle,» n° 55, p. 545–561, 2021.
- [2] Lehuan Wu y et. al, «Conceptual design for the extractive distillation of cyclopentane and neohexane using a mixture of N,N-dimethyl formamide and ionic liquid as the solvent,» *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 129, pp. 197-208, 2018.
- [3] J. F. Richardson, J. H. Harker y J. R. Backhurst, *Chemical Engineering*, Oxford: Butterworth & Heinemann, 2002.
- [4] F. Petlyuk, *Distillation Theory and Its Application to Optimal Design of Separation Units*, Cambridge: Cambridge University Press, 2004.
- [5] C. S. Robinson y E. R. Gilliland, *Elements of Fractional Distillation*, 4th ed., New York,: McGraw-Hill, 1950.
- [6] J. D. Seader y E. J. Henley, *Separation Process Principles*, New York: Wiley, 2006.
- [7] P. C. Wankat, *Equilibrium Staged Separations: Separations for Chemical Engineers*, New Jersey: Prentice-Hall, 1988.
- [8] R. Treybal, *Operaciones de Transferencia de Masa*, México: Mc Graw-Hill, 1997.
- [9] S. Robinson, *Simulation: The Practice of Model Development and Use*, West Sussex, England: John Wiley & Sons Ltd, 2004.
- [10] G. Korn, *Advanced Dynamic-State Simulation*, Hoboken, New Jersey : John Wiley, 2007.

- [11] A. Kumar Verma, *Process Modelling and Simulation in Chemical, Biochemical and Environmental Engineering*, Boca Ratón, Florida, USA: Taylor & Francis Group, 2015.
- [12] C. Chung, *Simulation Modeling Handbook: A Practical Approach*, Boca Ratón: CRC Press LLC, 2004.
- [13] A. Law, *Simulation modeling and analysis*, Tucson, Arizona, USA: McGraw-Hill Education, 2015.
- [14] W. A. Menner, «Introduction to Modeling and Simulation,» *Johns Hopkins Apl Technical Digest*, vol. 16, nº 1, pp. 6-17, 1995.
- [15] J. P. Wauquier, *Petroleum Refining, Vol 2. Separation Processes.*, Paris: Editions Technip, 2000.
- [16] E. C. Carlson, «Don't Gamble with Physical Properties for Simulations,» *CHEMICAL ENGINEERING PROGRESS*, pp. 35-46, 1996.
- [17] A. Creus Solé, *Simulación de Procesos con PC*, Barcelona: Marcombo S. A., 1989.
- [18] W. Bequette, *Process Dynamics. Modeling, Analysis, and Simulation*, New Jersey: Prentice-Hall, Inc, 1998.
- [19] U. Diwekar, *Batch Distillation. Simulation, Optimal Design, and Control*, Boca Raton. Florida. USA: CRC Press. Taylor & Francis Group., 2012.
- [20] I. Gil, L. García y G. Rodríguez, «Simulation of ethanol extractive distillation with mixed glycols as separating agent,» *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, vol. 31, nº 1, pp. 259 - 270, 2014.