

ANÁLISIS TERMO-ECONÓMICO DE UN ESQUEMA TECNOLÓGICO PARA LA
PRODUCCIÓN DE ETANOL ANHIDRO POR DESTILACIÓN EXTRACTIVA

JUAN DIEGO CASTAÑEDA VARGAS

FUNDACIÓN UNIVERSIDAD DE AMÉRICA
FACULTAD DE INGENIERÍAS
PROGRAMA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BOGOTÁ D.C.
2019

ANÁLISIS TERMO-ECONÓMICO DE UN ESQUEMA TECNOLÓGICO PARA LA
PRODUCCIÓN DE ETANOL ANHIDRO POR DESTILACIÓN EXTRACTIVA

JUAN DIEGO CASTAÑEDA VARGAS

Proyecto integral de grado para optar por el título de
INGENIERO QUÍMICO

Director
Jaime Eduardo Arturo Calvache.
Ingeniero Químico.

FUNDACIÓN UNIVERSIDAD DE AMÉRICA
FACULTAD DE INGENIERÍAS
PROGRAMA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BOGOTÁ D.C.
2019

Nota De Aceptación

Jaime Eduardo Arturo Calvache
Ingeniero Químico

Felipe Correa Mahecha
Ingeniero Químico

Juan Camilo Cely Garzón
Ingeniero Químico

Bogotá, D.C. Febrero, 2019

DIRECTIVAS DE LA UNIVERSIDAD

Presidente de Universidad y Rector del Claustro.

Dr. JAIME POSADA DÍAZ

Vicerrector de Desarrollo y Recursos Humanos.

Dr. LUIS JAIME POSADA GARCÍA-PEÑA

Vicerrectora Académica y de Posgrados.

Dra. ANA JOSEFA HERRERA VARGAS

Decano de la Facultad de Ingenierías.

Ing. JULIO CESAR FUENTES ARISMENDI

Director General de Investigación y proyección social.

Dr. MANUEL CANCELADO JIMENEZ

Director del Programa de Ingeniería Química.

Ing. LEONARDO DE JESÚS HERRERA GUTIÉRREZ

Las directivas de la Fundación Universidad de América, los jurados calificadores y el cuerpo docente no son responsables por los criterios e ideas expuestas en el presente documento. Estos corresponden únicamente a los autores.

DEDICATORIA

*En memoria a mis abuelas, Carmen y María
¿Qué hubiera sido de nosotros sin ustedes princesas?*

*A ti padre mío, Pedro E. Castañeda
Por confiar en mis capacidades
Por guiarme y compartir el compromiso de mi vida
Por ayudarme cuando más lo necesite
Por entenderme en las situaciones más difíciles
Por enseñarme las cosas más esenciales
Por siempre brindarme el calor característico tuyo
Por darme una gran mano a mi pequeña vida*

*A ti madre mía, Liliana Vargas C.
Por confiar en lo que soy
Por enseñarme a luchar por lo que quiero
Por inculcarme la humildad y la felicidad
Por ayudarme a ser lo que seré
Por siempre buscar el ocaso a las situaciones oscuras*

*A ti nano, Edison Barbosa
Por ser un maravilloso hermano y compañero
Por ser uno de los pilares de mi vida
Por aconsejarme y empujarme hacia el éxito
Por el vínculo que nos mantendrá siempre unidos
Por brindarme la felicidad con tus actos y logros*

*A las personas que confiaron y nunca dudaron de mis capacidades
Gracias por siempre apoyarme, aguantarme y brindarme su apoyo
Realmente Dios se los pague toda la vida*

*Gracias a ustedes, mi gran familia.
Este logro, es para ustedes.*

Iq. Diego Castañeda

AGRADECIMIENTOS

Quiero agradecer al Ing. Jaime E. Arturo C por su confianza en mí y en mis capacidades, por su continuo acompañamiento, también al Ing. Felipe Correa Mahecha por su ayuda en momentos críticos, por impulsarme a brindar lo mejor de mí sin importar cual fuera la adversidad, Al grupo de separación no convencionales (GPS) al acogerme e integrarme en esa gran familia brindándome un gran proyecto que desarrolle con orgullo.

A mis compañeros de estudio, por darme la oportunidad de guiarlos, enseñarles y aprender juntos cada concepto de la carrera, por cada momento de risas, de estrés, de tristeza y de euforia que tuvimos, gracias muchachos por ayudarme y animarme con las cosas más elocuentes del mundo.

A mis amigos cercanos, por sus consejos en los momentos indispensables, por su compromiso con la lealtad de nuestra amistad, por siempre acompañarme a las locuras en el transcurso de este proyecto. No lo podría haber logrado sin su acompañamiento y su fortaleza.

A mi padre Pedro, por su amor incondicional y sus consejos pertinentes así como sólidos, a mi madre Liliana, por su entusiasmo y felicidad característica, a mi nano Edison, por su sinergia de jocosidad y responsabilidad, A mi cuñada Diana, por su amistad y el gran ejemplo que me brindo. Sin ustedes, mi motor de vida, este logro no podría ser posible; Acompañándome incondicionalmente todo este tiempo, siempre apoyándome en mis peores momentos. Familia, sin ustedes no hubiera aprendido el camino correcto de la vida, Dios nos bendiga y nos de fortaleza para seguir siempre adelante.

A los recuerdos que me llevaron a hacer este proyecto realidad, sin ellos no podría haber desarrollado fortaleza y disciplina, recordando siempre quien soy y los ideales que sigo, aquellas personas que lograron marcarme, Dios las bendiga. Sus recuerdos serán tesoros para mí, espero jamás corrompan sus verdaderos deseos.

Y, por último, a Dios, por regalarme el tiempo, por brindarme la sabiduría y la ciencia para poder hacer este proyecto realidad, por bendecirme cada día con maravillosas personas a mi alrededor y por darme la mejor experiencia de mi vida, La parroquia Jesucristo Nuestra Pascua.

Sin ninguno de ustedes no lo habría podido lograr, y por eso realmente les doy mis más sinceros agradecimientos. Chicos, jamás se olviden de la gracia de la vida y de siempre seguir su propia felicidad. Sigán creciendo, nos veremos a medida que esta fuerza imparable llamada tiempo nos lo permita...

Ing. Químico Juan Diego Castañeda Vargas

CONTENIDO

	pág.
RESUMEN	17
INTRODUCCIÓN	18
OBJETIVOS	20
1. GENERALIDADES	21
1.1 Etanol Anhidro	21
1.1.1 Normatividad.	23
1.1.2 Producción de etanol anhidro en Colombia.	24
1.2 Destilación extractiva	29
1.2.1 Termodinámica y topología.	30
1.2.2 Entrainer comúnmente usados para el sistema Etanol Agua.	32
1.2.3 Esquema tecnológico empleado.	34
1.3 Termoecología	35
1.3.1 Energía.	36
1.3.2 Entropía..	37
1.3.3 Exergía.	37
1.3.4 Análisis Termoecológico.	38
1.4 Optimización	39
2. ESQUEMA TECNOLÓGICO DE DESTILACIÓN EXTRACTIVA	42
2.1 Equipos de transferencia de masa	42
2.1.1 Torre de destilación extractiva.	42
2.1.2 Torre de recuperación.	44
2.2 Equipo de transferencia de Calor	44
2.2.1 Intercambiador de calor.	44
2.3 Esquema global	45
2.3.1 Grados de libertad.	45
3. TERMOECOLOGÍA	48
3.1 Exergía y disponibilidad	48
3.1.1 Cálculos exergético.	51
3.2 Análisis económico	52
3.2.1 Modelo económico.	52
3.2.2 Dimensionamiento de torres de destilación.	54
3.3 Estimación de costos exergeticos.	58
3.3.1 Análisis R/P/I.	59
3.4 Calculos Termoecologicos	60
3.4.1 Valor termoecológico por perdidas exergéticas.	62
4. MODIFICACIONES DEL ESQUEMA TECNOLÓGICO	63
4.1 Teoría general de la optimización	63

	pág.
4.2 Optimización Multivariable	65
4.2.1 Optimización en ASPEN PLUS ®.	66
4.3 Metodología de optimización	67
4.3.1 Análisis de sensibilidad.	68
4.3.2 Resultados de la optimización.	71
4.3.3 Análisis Post-Optimización.	73
4.3.4 Valor termoecónomico.	76
5. CONCLUSIONES	77
6. RECOMENDACIONES	78
BIBLIOGRAFIA	79
ANEXOS	86

LISTA DE ANEXOS

	pág.
Anexo A. Pseudo equilibrios de fases para el sistema etanol agua etilenglicol	866
Anexo B. Calculos exergeticos para el esuqema tecnologico	888
Anexo C. Calculos para el dimencionamiento de las columnas de destilación	911
Anexo D. Planteamiento de ecuaciones costos exergeticos para el esquema tecnologico	944
Anexo E. Planteamiento de ecuaciones costos termoeconomicos para el esquema tecnologico	955
Anexo F. Tablas de superficies de respuesta para la optimización de la torre de destilación extractiva	966
Anexo G. Costos exergeticos y termoeconomicos para el esquema tecnologico optimizado	988

LISTA DE FIGURAS

	pág.
Figura 1. Distribución colombiana de producción y consumo de etanol para el año 2018	26
Figura 2. Comportamiento económico del etanol carburante, mezcla E8 y gasolina para el año 2018	28
Figura 3. Equilibrio isobárico de fases para el sistema Etanol-Agua a 1 atm de presión	31
Figura 4. Pseudo-Equilibrio isobárico para el sistema Etanol-Agua con Etilenglicol como entrainer a 1 atm de presión	32
Figura 5. Esquema de destilación extractiva propuesta para el análisis termo económico	34
Figura 6. Diagrama PFD para la destilación extractiva	47
Figura 8. Comportamiento de la función lúdica $f(x)$	65
Figura 9. Análisis de sensibilidad para la cantidad de solvente de la destilación extractiva parametrizando el reflujo a 0,6 y el flujo de destilado a 85 kmol/h	69
Figura 10. Análisis de sensibilidad para el reflujo de la destilación extractiva parametrizando el flujo de destilado a 85 kmol/h y la cantidad de solvente de 60 kmol/h.	70
Figura 11. Analisis de sensibilidad para el flujo de destilado de la destilación extractiva parametrizando reflujo a 0,8 y la cantidad de solvente a 60 kmol/h.	71
Figura 12. Optimización para el numero de etapas en la columna de destilación extractiva	73
Figura 13. Superficie de respuesta para la generación de entropía en un rango amplio de operación	74
Figura 14. Superficie de respuesta para el costo total anualizado (TAC) para el sistema en un amplio rango de operación	75

LISTA DE TABLAS

	pág.
Tabla 1. Propiedades fisicoquímicas comunes para el etanol anhidro	24
Tabla 2. Análisis de grados de libertad para la columna de destilación extractiva	43
Tabla 3. Análisis de grados de libertad para la columna de recuperación	44
Tabla 4. Grados de libertad para el esquema tecnológico de destilación extractiva para la producción de alcohol carburante	45
Tabla 5. Trabajo perdido para cada uno de los equipos presentes en el esquema tecnologico	51
Tabla 6. Resultados del cálculo de diámetro de las columnas de destilación	54
Tabla 7. Dimensionamiento total para el esquema tecnológico	56
Tabla 8. Servicios térmicos comúnmente utilizados para torres de destilación	58
Tabla 9. Calculo de costos totales anualizados para el esquema tecnologico	58
Tabla 10. Resultados obtenidos para los costos exergéticos (c_i) y termoeconómicos (π_i)	61
Tabla 11. Tabla resumen para el teorema de derivada de orden superior	64
Tabla 12. Resultados de la optimización SQP con la función objetivo de carácter térmico	72
Tabla 13. Comparación de valor de perdida exergética para el esquema original y optimizado	76
Tabla 14. Datos para el pseudo equilibrio de fases para etanol agua etilenglicol modelado por NTRL (γ) y RK (ϕ)	86
Tabla 15. Datos de equilibrio liquido vapor para el sistema etanol agua a 1 atm de presión	87
Tabla 16. Resultados obtenidos para los costos exergéticos (c_i)	94
Tabla 17. Resultados obtenidos para los costos termoeconómicos (π_i)	95
Tabla 18. Valores extras para la optimización del número de etapas	96
Tabla 19. Valores calculados para la superficie de respuesta para la entropía generada	96
Tabla 20. Valores calculados para la superficie de respuesta para la entropía generada	97
Tabla 21. Comparación entre costos exergéticos (c_i) y termoeconómicos (π_i) para el esquema tecnológico con la optimización	98

LISTA DE CUADROS

	pág.
Cuadro 1. Mezclas que han sido probadas de etanol anhidro	22
Cuadro 2. Algunas normatividades colombianas para el etanol carburante	23
Cuadro 3. Producción de etanol en ingenios a nivel nacional para el año 2018	27
Cuadro 4. Indicadores históricos nacionales en la producción de etanol para el año 2018	27
Cuadro 5. Algunos métodos para la obtención de etanol anhidro por diferentes destilaciones no convencionales	33
Cuadro 6. Revisión literaria sobre algunos modelos económicos útiles para destilación.	52
Cuadro 7. Modelos de optimización disponibles en el simulador ASPEN PLUS ® en su versión 9.0	66

LISTA DE ECUACIONES

	pág.
Ecuación 1. Eficiencia de primera ley o eficiencia carnotiana	35
Ecuación 2. Definición termodinámica de entalpia	36
Ecuación 3. Definición termodinámica para la entropía	37
Ecuación 4. Definición termodinámica de la exergía	37
Ecuación 5. Relación entre exergía destruida y entropia generada	38
Ecuación 6. Balance de insumos para un equipo	39
Ecuación 7. Costo unitario de energia util	39
Ecuación 8. Función Multiplicadores de lagrange	41
Ecuación 9. Cuantificación de la exergía para una corriente	49
Ecuación 10. Balance de exergía para un equipo	49
Ecuación 11. Calculo de disponibilidad para una corriente	50
Ecuación 12. Balance de disponibilidad para un equipo	50
Ecuación 13. Trabajo mínimo para una columna de destilación	50
Ecuación 14. Eficiencia energética de separación para una columna de destilación	50
Ecuación 15. Longitud mínima para una columna de destilación	55
Ecuación 16. Longitud real para una columna de destilación	55
Ecuación 17. Ecuación de diseño de un intercambiador de calor	56
Ecuación 18. Calculo del Costo total anualizado (TAC)	56
Ecuación 19. Calculo del costo capital para el cilindro y las etapas en una columna de destilación	57
Ecuación 20. Calculo de costos capitales para un intercambiador de calor	57
Ecuación 21. Costo exergetico para una corriente i	59
Ecuación 22. Balance de costos exergéticos para cada equipo del sistema	60
Ecuación 23. Balance de insumos para la columna de destilación extractiva	61
Ecuación 24. Valor termoecónomico de las pérdidas de exergía	62
Ecuación 25. Definición matematica de punto singular	63
Ecuación 26. Criterio de derivada de orden superior	64
Ecuación 27. Ecuación base de los multiplicadores de Lagrange	65
Ecuación 28. Matriz hessiana acotada	66
Ecuación 29. Problema de optimización planteado para la torre de destilación extractiva	68

LISTA DE SÍMBOLOS

“En el proyecto se utilizó el sistema internacional”
 “,” para decimales y “.” para miles

Símbolo	Definición [Unidad]
<i>A</i>	Área. [m ²]
<i>A</i>	Disponibilidad. [GJ/h]
<i>C</i>	Numero componentes. [Adimensional]
<i>C</i>	Costo total exergético. [U\$/s]
<i>c</i>	Costo de corriente exergético. [U\$/kmol]
<i>D</i>	Flujo de destilado. [kmol/h]
<i>d</i>	Diámetro. [m]
<i>E</i>	Porcentaje de bioetanol en mezcla. [% v/v]
<i>Ex</i>	Exergía molar. [GJ/h]
<i>F</i>	Flujo de una corriente. [GJ/h]
<i>h</i>	Entalpia especifica. [kJ/kmol]
<i>L</i>	Función langreana. [adimensional]
<i>L</i>	Longitud de columna. [m]
<i>LTMD</i>	Media logarítmica de temperatura. [K o °C]
<i>LW</i>	Trabajo perdido. [m]
<i>N</i>	Numero de etapas teóricas. [Adimensional]
<i>N</i>	Numero de fases esperado. [Adimensional]
<i>P</i>	Presión. [Atm, bar, kPa]
<i>RR</i>	Reflujo molar. [Adimensional]
<i>Q</i>	Calor. [GJ/h]
<i>s</i>	Entropía molar específica. [kJ/kmol K]
<i>S/F</i>	Relación solvente alimento. [Adimensional]
<i>T</i>	Temperatura. [K o °C]
<i>TAC</i>	Costo total anualizado. [k\$/año]
<i>u</i>	Energía interna especifica. [kJ/kmol]
<i>U</i>	Coeficiente global de transferencia de calor. [KW/m ² K]
<i>v</i>	Volumen especifico. [m ³ /kg]
<i>W</i>	Trabajo. [GJ/h]
<i>x</i>	Composición en la fase liquida. [Adimensional]
<i>y</i>	Composición en la fase de vapor. [Adimensional]
<i>Z</i>	Costos de diseño conceptual. [Adimensional]
 Subíndices	
<i>Cond</i>	Condensador de torre.
<i>i</i>	Componente i de la mezcla.
<i>k</i>	Equipo k del esquema tecnológico.
<i>gen</i>	Propiedad generada

<i>sat</i>	Propiedad en estado de saturación.
<i>Reb</i>	Rehervidor de la torre.
<i>Rev</i>	Propiedad reversible.
<i>min</i>	Propiedad min.
<i>o</i>	Propiedad muerta.

Superíndices

<i>l</i>	Fase Líquida.
<i>v</i>	Fase Vapor.

Letras griegas

φ	Coeficiente de fugacidad. [Adimensional]
γ	Coeficiente de actividad. [Adimensional]
η	Eficiencia térmica de destilación. [Adimensional]
π	Costo termoecónomico. [k\$/s]
σ	Variable de sensibilidad del modelo de optimización. [Adimensional]
μ	Restricción del modelo de optimización. [Adimensional]
ξ	Espaciamiento entre plato y plato. [m]
ψ	Trabajo y calor para la ecuación 16. [GJ/h]
π_d	Valor de disponibilidad destruida. [Adimensional]

RESUMEN

El etanol carburante es un biocombustible de gran interés actualmente, es por esto que el mercado ha evolucionado para la producción de dicho biocombustible de manera más barata, es aquí donde se aplica la termoeconomía, realizando un análisis termoeconómico a un esquema tecnológico simulado en ASPEN PLUS® en su versión 9.0; Se logra realizar dicho análisis y cuantificar los precios exergético y termoeconómico para cada una de las corrientes presentes en el sistema, de manera paralela realizando un análisis exergético para la cuantificación del trabajo perdido y así obteniendo el costo de pérdida exergética.

La metodología desarrollada para realizar la termoeconomía es tomada de la literatura y dividida en 4 pasos importantes, el análisis exergético o de disponibilidad de segunda ley, teniendo en cuenta el equilibrio del entorno, el análisis económico cuantificado por las correlaciones para especializadas para destilación encontrado por medio de una revisión bibliográfica, la cuantificación de costos exergéticos para saber el costo de la energía útil, y por último con un balance de insumos/económico, determinar el costo termoeconómico para cada corriente presente.

Teniendo dicho análisis, se procede a optimizar el sistema mediante una función objetivo indirecta que relaciona la cantidad de calor suministrado por mol de destilado producida bajo las restricciones de etanol anhidro y una salida de etanol por fondos no mayor a 0,2% en base molar. Al optimizar el proceso se pudo encontrar que parámetros como la inversión por TAC y la entropía generada son minimizadas y con ello el costo de pérdida exergética.

PALABRAS CLAVE: Destilación Extractiva – Etanol Anhidro – Análisis Termoeconómico– Optimización – Disponibilidad

INTRODUCCIÓN

Hoy en día la energía es un recurso fundamental en cualquier industria¹. A medida que transcurre el tiempo, la necesidad de desarrollar nuevas tecnologías para la producción de un compuesto en específico y la preocupación sobre la mitigación de impactos ambientales han llevado al uso de procesos no convencionales^{2,3}. Un ejemplo del anterior argumento es la mezcla de etanol anhidro en gasolina (conocidas como *gasohol*)⁴, con la finalidad de disminuir las emisiones de gases de combustión (SO_x, NO_x y CO) precursoras del calentamiento global⁵ y como segundo objetivo reducir la dependencia a los hidrocarburos.

El etanol anhidro se produce por vía microbiológica a partir de la fermentación anaerobia de azúcares en un medio de cultivo⁶, el resultado de este procedimiento es un caldo en el cual se encuentra etanol y otros subproductos en fase acuosa, dicha caldo pasa a un proceso de separación donde la termodinámica de la solución impide purificar el etanol hasta el 90% (fracción molar) con el uso de destilación convencional⁷.

En solución a la limitante termodinámica para la obtención de etanol anhidro es el uso de métodos de separación no convencionales como la destilación extractiva⁸, en el cual con ayuda de un solvente llamado *entrainer* o agente material de separación, es posible desplazar el azeótropo y obtener composiciones superiores a las del punto azeotrópico de etanol, las mezclas de etanol a alta pureza se conocen como etanol-anhidro (por su significado: ausencia de humedad).

La destilación extractiva cuenta con un gran problema, al utilizar dos torres de destilación⁹ (la primera de separación y la segunda de recuperación de solvente) la

¹ WORRELL, E., et al. Energy consumption by industrial processes in the European Union. 1994 En: ENERGY. vol. 19, no. 11, p. 1113-1129

² ALKORTA, Ibon; ROZAS, Isabel and ELGUERO, José. Non-conventional hydrogen bonds. 1998 En: CHEMICAL SOCIETY REVIEWS. -01-01.vol. 27, no. 2, p. 163-170

³ XIA, Younan, et al. Unconventional Methods for Fabricating and Patterning Nanostructures. 1999 En: CHEMICAL REVIEWS. July 1,.vol. 99, no. 7, p. 1823-1848

⁴ WHEALS, Alan E., et al. Fuel ethanol after 25 years. 2000 En: TRENDS IN BIOTECHNOLOGY. vol. 17, no. 12, p. 482-487

⁵ GIL, I. D.; GARCÍA, L. C. and RODRÍGUEZ, G. Simulation of ethanol extractive distillation with mixed glycols as separating agent. 2014 En: BRAZILIAN JOURNAL OF CHEMICAL

⁶ SUN, Ye and CHENG, Jiayang. Hydrolysis of lignocellulosic materials for ethanol production: a review. 2002 England: Elsevier Ltd, 2002. 1-11 ISBN 0960-8524.

⁷ URAGAMI, Tadashi, et al. Dehydration of an Ethanol/Water Azeotrope by Novel Organic-Inorganic Hybrid Membranes Based on Quaternized Chitosan and Tetraethoxysilane. 2004 En: BIOMACROMOLECULES. July 1,.vol. 5, no. 4, p. 1567-1574

⁸ GIL Ibid. p. 2

⁹ MEIRELLES, Antonio; WEISS, Siegfried and HERFURTH, Herbert. Ethanol dehydration by extractive distillation. 1992 En: JOURNAL OF CHEMICAL TECHNOLOGY & BIOTECHNOLOGY.

energía suministrada al sistema no es aprovechada en su totalidad^{10,11}, es por esto que en el presente trabajo se busca una configuración de un esquema tecnológico para la producción de etanol anhidro que tenga menores pérdidas a comparación de la configuración original^{12,13,14}.

Con la ejecución de este proyecto se pretende mejorar las condiciones de operación del esquema tecnológico para la obtención de etanol anhidro por destilación extractiva con solvente etilenglicol, y comparar, mediante un análisis termo-económico; Bajo diferentes hipótesis, si el sistema tiene una mejor eficiencia energética en comparación a la original y de los costos generalizados de operación de este esquema tecnológico, y con esto en posteriores investigaciones profundizar y mejorar el esquema tecnológico bajo el ingreso de nuevos equipos y acoplarlo a una planta de operación.

¹⁰ BRITO, K. D., et al. Economic evaluation of energy saving alternatives in extractive distillation process. En: COMPUTERS AND CHEMICAL ENGINEERING. 2016.vol. 93, p. 185-196

¹¹ LOPEZ NAVARRO, Derly Lorena. EVALUACIÓN ENERGÉTICA DE ESQUEMAS TECNOLÓGICOS PARA LA PRODUCCIÓN DE ETANOL ANHIDRO POR DESTILACIÓN EXTRACTIVA. Fundación Universidad de América, 2017. p. 30-40.

¹²GUTIÉRREZ G, Roberto; SEGOVIA H, Juan Gabriel and HERNÁNDEZ, Salvador. Reducing energy consumption and CO₂ emissions in extractive distillation. 2009 En: CHEMICAL ENGINEERING RESEARCH AND DESIGN. vol. 87, no. 2, p. 145-152

¹³ SUCKSMITH, I. Extractive distillation saves energy. 1982. United States: 1982. 91-95

¹⁴ TOVAR C, Nataly T., Análisis exergético y de segunda ley del esquema tecnológico por destilación extractiva. Fundación Universidad de América, 2018 p. 15-26.

OBJETIVOS

OBJETIVO GENERAL

Realizar un análisis termo-económico de un esquema tecnológico para la producción de etanol anhidro por destilación extractiva.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Identificar las condiciones y variables de operación del esquema tecnológico a analizar.
- Configurar el esquema tecnológico empleando un simulador de procesos para incluir un criterio de eficiencia energética.
- Desarrollar el análisis termo-económico del esquema tecnológico.
- Realizar en el simulador un análisis de sensibilidad para el proceso.

1. GENERALIDADES

1.1 ETANOL ANHIDRO

Actualmente el etanol anhidro ha sido foco de investigación y de producción, no solo por el efecto positivo que tiene en términos ambientales¹⁵, sino por la disminución de costos en mezclas de combustibles en mezcla. Realmente este se produce desde la fermentación de una materia prima, la cual debe contener altas cantidades de azúcares fermentables, según la Federación de Biocombustibles colombiano, la producción está en el año 2017 dominada por la fermentación de bagazo de caña de azúcar (el cual es un residuo de la producción de panela).¹⁶

El Etanol Anhidro o comúnmente llamado Etanol Carburante es aquella mezcla que tenga en su componente mayoritario etanol, Según la NTC 5389 debe contener al menos un porcentaje molar del 99,9% para que una solución de etanol se considere anhidro¹⁷, es decir, que la cantidad de agua que debe tener es la menor cantidad posible, la cual es una restricción de la operación por la cual se separa este compuesto¹⁸.

La idea de etanol como combustible comienza hacia el año 1940, en donde EEUU comienza la producción de bioetanol a partir de la fermentación de maíz¹⁹, debido a su alta cantidad de azúcares, era factible esta fermentación²⁰, la cual después de retirar la biomasa, se obtenía una solución mayoritaria de agua y en pocas cantidades etanol. Tiempo después se encuentra que este puede ser utilizado como un combustible, la primera aproximación a esto fue pruebas en mezcla con gasolina convencional²¹. De este hecho se toma la nomenclatura de gasoholes con

¹⁵ BRITO Op. Cit. p. 23

¹⁶FEDERACIÓN NACIONAL DE BIOCOMBUSTIBLES DE COLOMBIA. Información estadística sector biocombustibles [En línea]. [Consultado el May 16,2018]. Disponible en: [http://www.fedebiocombustibles.com/estadistica-mostrar_info-titulo-Alcohol_Carburante_\(Etanol\).html](http://www.fedebiocombustibles.com/estadistica-mostrar_info-titulo-Alcohol_Carburante_(Etanol).html)

¹⁷ NTC 5308 del 26 de noviembre del 2005, ETANOL ANHIDRO COMBUSTIBLE DESNATURALIZADO OBTENIDO A PARTIR DE BIOMASA, PARA MEZCLAR CON GASOLINAS MOTOR, EMPLEADO COMO COMBUSTIBLE EN VEHÍCULOS CON MOTORES DE COMBUSTIÓN INTERNA DE ENCENDIDO POR CHISPA [Consultado el May 23, 2018]

¹⁸ GARCÍA-HERREROS, Pablo, et al. Optimization of the Design and Operation of an Extractive Distillation System for the Production of Fuel Grade Ethanol Using Glycerol as Entrainer. 2011 En: INDUSTRIAL & ENGINEERING CHEMISTRY RESEARCH. April 6, vol. 50, no. 7, p. 3977-3985

¹⁹ WHEALS Ibid p. 17.

²⁰ CARDONA, Carlos A. and SÁNCHEZ, Oscar J. Fuel ethanol production: Process design trends and integration opportunities. 2007 En: BIORESOURCE TECHNOLOGY. vol. 98, no. 12, p. 2415-2457

²¹ MEIRELLES, Antonio; WEISS, Siegfried and HERFURTH, Herbert. Ethanol dehydration by extractive distillation. En: JOURNAL OF CHEMICAL TECHNOLOGY & BIOTECHNOLOGY. 1992 - 01-01. vol. 53, no. 2, p. 181-188

composiciones “E”²², Donde E es el porcentaje de etanol el cual esta mezclado junto a la gasolina, en ejemplo de ello, una mezcla E8 (la cual es generalmente utilizada en Colombia) contiene 92% de gasolina y un 8% de etanol en fracción volumétrica. En la Tabla 1 son mostradas mezclas de combustibles con etanol comúnmente utilizadas en EEUU, Canadá y Brasil los cuales han sido probados obteniendo resultados eficaces en comparación a mezclas de gasolinas usadas.²³

Cuadro 1. Mezclas que han sido probadas de etanol anhidro

Combustible	Composición	
E5	Gasolina súper sin plomo	95%
	Etanol 99.5% (%vol)	5%
E8	Gasolina súper sin plomo	92%
	Etanol 99.5% (%vol)	8%
E10	Gasolina súper sin plomo	90%
	Etanol 99.5% (%vol)	10%
E15	Gasolina súper sin plomo	85%
	Etanol 99.5% (%vol)	15%
E85	Gasolina súper sin plomo	95%
	Etanol 99.5% (%vol)	5%
	Metanol Anhidro	5%
E93	Queroseno	2%
	Etanol 99.5% (%vol)	93%
E95	Nafta súper sin plomo	5%
	Etanol 99.5 (%vol)	95%
E100	Etanol 99.5 (%vol)	100%

Fuente: LOPEZ, J.A. y LOZADA, H. Obtención de etanol anhidro a partir de un proceso de destilación con adición de electrolitos. Trabajo de grado ingeniería química. Manizales: Universidad Nacional de Colombia. Facultad de Ingeniería y arquitectura. Departamento de Ingeniería química, 2005. p 3-4.

²²HIGUERA O.F., TRISTANCHO, J.L. y FLOREZ L.C. Biocombustibles y su aplicación en Colombia. Universidad Tecnológica de Pereira, 2007 p 171-175

²³ LOPEZ, J.A. y LOZADA, H. Obtención de etanol anhidro a partir de un proceso de destilación con adición de electrolitos. Trabajo de grado ingeniería química. Manizales: Universidad Nacional de Colombia. Facultad de Ingeniería y arquitectura. Departamento de Ingeniería química, 2005. p 3-4.

1.1.1 Normatividad. El etanol carburante, como cualquier producto de Colombia es regulado y restringido por normas legales que desembocan a técnicas colombianas (NTC) para la producción, almacenamiento y distribución, estas han ido avanzando en acorde a la demanda y a las necesidades del mercado, en el Cuadro 2 se muestran algunas normas vigentes para el año 2018 con una descripción de la contenida en cada una de ellas.

Cuadro 2. Algunas normatividades colombianas para el etanol carburante

Norma	Descripción
Resolución 180687 MinMinas ²⁴	Definición de etanol carburante como un compuesto orgánico líquido de naturaleza diferente a los hidrocarburos
Ley 939 – 31 Dic 2004 ²⁵	Definición de etanol carburante como un biocombustible obtenido a partir de biomasa
Ley 693 de 2001 ²⁶	Reglamenta el uso de compuestos oxigenados (tales como alcoholes carburantes) en las mezclas de gasolinas que se usen en el país
NTC 5308 ²⁷	El cual cubre el uso de mezclas de gasolina y etanol carburante en un 10% ± 0,5% en motores de combustión interna
Resolución 40185 Feb 27 de 2018 ²⁸	En la cual establece que a nivel nacional, el uso de combustibles con etanol carburante para gasolina corriente y extra de E10
Resolución 40626 Jul 04 de 2017 ²⁹	En la cual se muestra un indicador de disminución de emisión de gases de efecto invernadero en mezclas de gasolina con etanol carburante

²⁴ MINISTERIO DE MINAS Y ENERGIA, Resolución 180687; (Jun 7). 2017. [Consulado el May 23, 2018]

²⁵ CONGRESO DE COLOMBIA. Ley 939. Dic 31.,p. 1-9. [Consulado el May 23, 2018]

²⁶ MINISTERIO DE MINAS Y ENERGIA Ley 693; (Sep 19,). 2001. [Consulado el May 23, 2018]

²⁷ NTC 5308 del 26 de Noviembre del 2005, ETANOL ANHIDRO COMBUSTIBLE DESNATURALIZADO OBTENIDO A PARTIR DE BIOMASA, PARA MEZCLAR CON GASOLINAS MOTOR, EMPLEADO COMO COMBUSTIBLE EN VEHÍCULOS CON MOTORES DE COMBUSTIÓN INTERNA DE ENCENDIDO POR CHISPA [Consulado el May 23, 2018]

²⁸ MINISTERIO DE MINAS Y ENERGIA. Resolución 40185 Feb 27 de 2018. Feb 27,. [Consulado el May 23, 2018]

²⁹ MINISTERIO DE MINAS Y ENERGIA. Resolución 40626; Jul 04,. [Consulado el May 23, 2018]

Cuadro 2. (Continuación)

Norma	Descripción
Ley 1715 May 13 de 2014 ³⁰	Por el cual se regula la integración de las energías renovables no convencionales al sistema energético nacional

Fuente: elaboración propia adaptado de Federación colombiana de biocombustibles disponible en: <http://www.fedebiocombustibles.com/v3/main-pagina-id-29.htm>

Otra norma común para el etanol carburante es el Decreto 1135 del 2009³¹, la cual exige que para vehículos que se fabriquen de hasta 2000 cm³ deben estar cada vez más acondicionados para el uso de combustibles de mayor mezcla en etanol, respectivamente, esto con el fin de la disminución a la dependencia de la extracción de petróleo.

1.1.2 Producción de etanol anhidro en Colombia. Como antes se ha mencionado, las industrias encargadas en la producción de etanol son los ingenios azucareros, a partir de la fermentación de cultivos de caña de azúcar gracias a los azúcares fermentables. Según Murat et. a las propiedades fisicoquímicas del etanol carburante son cercanas a las mostradas en la Tabla 1³².

Tabla 1. Propiedades fisicoquímicas comunes para el etanol anhidro

Propiedad	Etanol
Punto de Ebullición (°C)	78,5
Densidad (kg/L)	0,792
Entalpia Vaporización (kJ/kg)	837
Temperatura Flash (°C)	21
Temperatura Autoignición (°C)	365-425
Relación Aire/Combustible	9,0
Viscosidad @20°C (cp)	1,2

Fuente: ÇETIN, Murat; YÜKSEL, Fikret and KUŞ, Hüsamettin. Emission characteristics of a converted diesel engine using ethanol as fuel. En: ENERGY FOR SUSTAINABLE DEVELOPMENT. vol. 13, no. 4, p. 250-254, 2009

³⁰ MINISTERIO DE MINAS Y ENERGIA. Ley 1715 May 13 de 2014. May 13, [Consultado el May 23, 2018]

³¹ MINISTERIO DE MINAS Y ENERGÍA. Decreto 1135 de 2009. Mar 31, [Consultado el May 24, 2018]

³² ÇETIN, Murat; YÜKSEL, Fikret y KUŞ, Hüsamettin. Emission characteristics of a converted diesel engine using ethanol as fuel. 2009 En: ENERGY FOR SUSTAINABLE DEVELOPMENT. vol. 13, no. 4, p. 250-254

El etanol anhidro es obtenido por biomasa (generalmente utilizando un *E-coli* genéticamente modificado) a partir de la fermentación e la caña de azúcar, esto ha repercutido positivamente en el mercado azucarero nacional, sin mencionar de la pertinencia de como una energía renovable; Además de lo anteriormente mencionado, diversos autores pueden reportar que por cada kg de etanol en combustión, se emiten 0,9 kg de CO₂ (Tan solo el 12,67% de CO₂ en comparación a un 1 kg de combustible derivado de petróleo).^{33,34}

En un enfoque a producción local latinoamericana, Colombia es el tercer productor de etanol con una producción de 754 millones de litros de etanol en el 2017 en plantas de 2.154 millones de litros de etanol diarios³⁵. Por otra parte, Brasil y Argentina ocupan el primer y segundo puesto en producción de etanol respectivamente. En la Figura 1 se puede observar la distribución nacional en la producción de etanol y el uso de combustibles en mezcla de etanol, nótese que la mayoría del país se utiliza las mezclas E8, pero en zonas de cercanía a Venezuela se utilizan mezclas E0, esto se debe al costo de combustibles por la frontera. Así mismo se muestran los seis ingenios más importantes de Colombia³⁶, el Ingenio Incauca, Ingenio Mayagüez, Ingenio Manuelita, ingenio Risaralda, ingenio Riopaila-castilla e ingenio providencia, como también el proyecto bioenergy, el cual tiene como objetivo maximizar la producción de etanol y otros biocombustibles en el sector Orinoco colombiano³⁷.

³³ASOCAÑA. El Sector Azucarero Colombiano, más que azúcar, una fuente de energía renovable para el país. [En línea]. [Consultado el May 28,2018]. Disponible en: <http://www.asocana.org/documentos/962016-6B8BD719-00FF00,000A000,878787,C3C3C3,0F0F0F,B4B4B4,FF00FF,2D2D2D.pdf>.

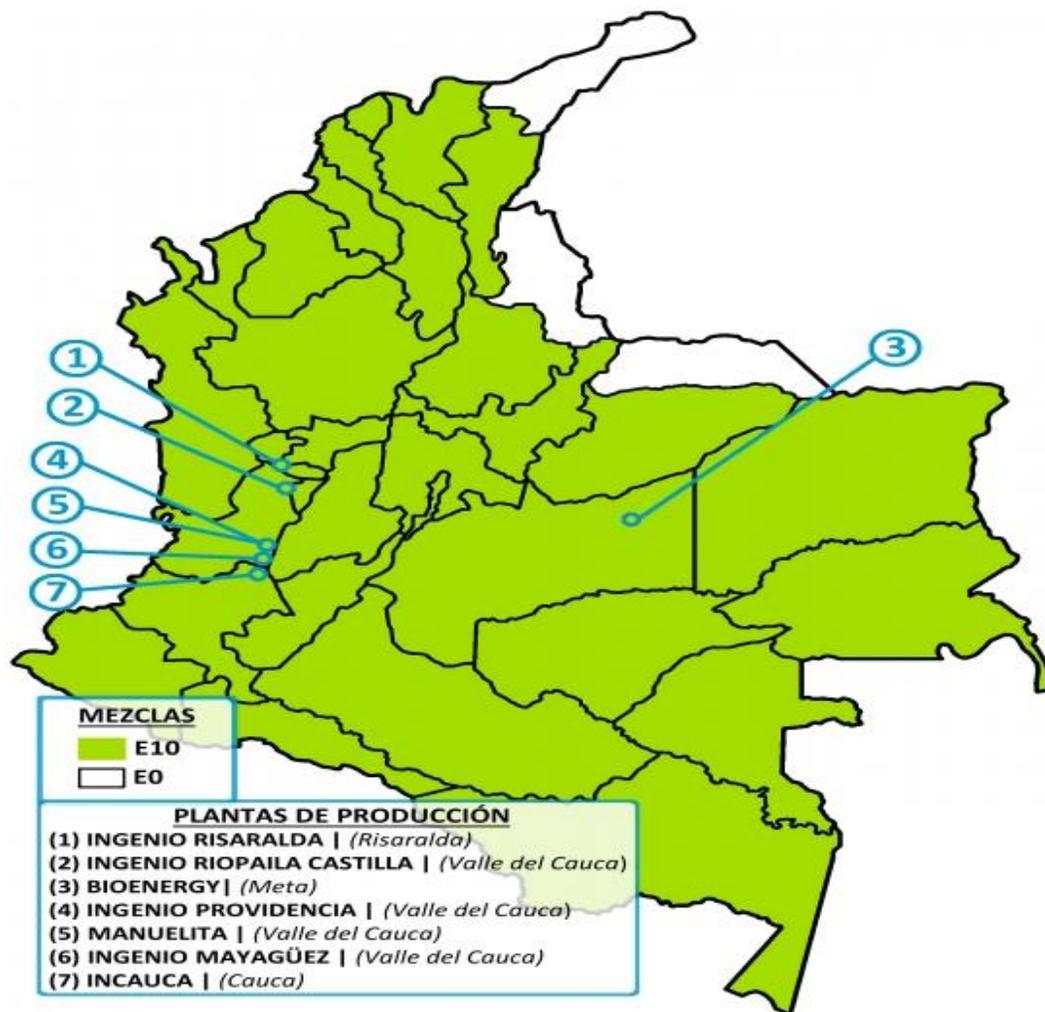
³⁴ ASOCAÑA. Aspectos generales del sector azucarero colombiano 2015-2016. [En línea]. [Consultado el May 28,2018]. Disponible en: <http://www.asocana.org/modules/documentos/11992.aspx>.

³⁵ COMISIÓN ECONÓMICA PARA AMÉRICA LATINA Y EL CARIBE. Brasil, Argentina y Colombia lideran producción de biocobustibles en la región. [En línea]. [Consultado Nov 23,2018] Disponible en: <https://www.cepal.org/es/comunicados/brasil-argentina-colombia-lideran-produccion-biocombustibles-la-region>

³⁶ BIOENERGY, Bioenergy expande la frontera agrícola en Colombia. [En línea]. [Consultado Nov 23 2018] Disponible en: <http://www.bioenergy.com.co/SitePages/Noticia.aspx?IdElemento=5>

³⁷ FEDERACIÓN NACIONAL DE BIOCMBUSTIBLES DE COLOMBIA. Información estadística sector biocombustibles. [En línea]. [Consultado el Nov 11,2018]. Disponible en: [http://www.fedebiocombustibles.com/estadistica-mostrar_info-titulo-Alcohol_Carburante_\(Etanol\).html](http://www.fedebiocombustibles.com/estadistica-mostrar_info-titulo-Alcohol_Carburante_(Etanol).html)

Figura 1. Distribución colombiana de producción y consumo de etanol para el año 2018



Fuente: FEDERACIÓN COLOMBIANA DE BIOCOMBUSTIBLES, Distribución de consumo y producción de etanol para el 2018. [En línea]. [Consultado el Jun 10,2018]. Disponible en: [http://www.fedebiocombustibles.com/v3/estadistica-mostrar_info-titulo-Alcohol_Carburante_\(Etanol\).htm](http://www.fedebiocombustibles.com/v3/estadistica-mostrar_info-titulo-Alcohol_Carburante_(Etanol).htm)

Los ingenios y el proyecto anteriormente mencionado, están posicionadas en zonas donde hay cultivo de caña de azúcar, así mismo, estas poseen plantas de producción de etanol, estas son mostradas en el cuadro 3 para cada ingenio presente en Colombia, para el 2018, se tiene en evidencia que la producción de etanol nacional es de 2'154.000 L al día³⁸.

³⁸FEDERACIÓN NACIONAL DE BIOCOMBUSTIBLES DE COLOMBIA. Información estadística sector biocombustibles. [En línea]. [Consultado el Nov 11,2018]. Disponible en: [http://www.fedebiocombustibles.com/estadistica-mostrar_info-titulo-Alcohol_Carburante_\(Etanol\).htm](http://www.fedebiocombustibles.com/estadistica-mostrar_info-titulo-Alcohol_Carburante_(Etanol).htm)

Cuadro 3. Producción de etanol en ingenios a nivel nacional para el año 2018

Ingenio (Departamento)	Área Sembrada (Hectáreas)	Capacidad Instalada	
		Molienda de caña (Ton/día)	Producción Etanol (L/día)
Bioenergy (Meta)	20.082	-	504.000
Riopaila-Castilla (Valle del cauca)	33.384	9.333	400.000
Incauca (Cauca)	24.630	14.000	350.000
Providencia (Valle del cauca)	25.038	7.000	300.000
Mayagüez (Risaralda)	20.865	5.833	250.000
Manuelita (Valle del cauca)	20.865	5.833	250.000
Risaralda (Risaralda)	2.886	5.000	100.000
Caldas	3.304	-	-
TOTAL	151.054	46.999	2'154.000

Fuente: FEDERACIÓN NACIONAL DE BIOCOMBUSTIBLES DE COLOMBIA. Información estadística sector biocombustibles. [En línea]. [Consultado el Nov 11,2018]. Disponible en: [http://www.fedebiocombustibles.com/estadistica-mostrar_info-titulo-Alcohol_Carburante_\(Etanol\).html](http://www.fedebiocombustibles.com/estadistica-mostrar_info-titulo-Alcohol_Carburante_(Etanol).html)

En primera medida se puede observar que el Valle del cauca tiene la mayoría de área sembrada seguida del proyecto bioenergy, en cambio, la mayor producción de etanol la tiene el proyecto bioenergy. Por otra parte algunos indicadores históricos son mostrados en la Cuadro 4, donde se puede ver la evolución del mercado de etanol.

Cuadro 4. Indicadores históricos nacionales en la producción de etanol para el año 2018

Indicador	2014	2015	2016	2017
Mercado Interno Azúcar (Millones tmvc)	1,71	1,72	1,81	1,67
Exportaciones de Azúcar (Millones tmvc)	0,79	0,72	0,51	0,70
Área Sembrada (Miles de Hectareas)	230,3	232,1	238,3	240,1
Producción de Etanol (Millones de Litros)	406,46	454,40	434,43	366,75
Ventas de Etanol (Millones de Litros)	418,52	468,04	439,3	361,53
Producción de Azúcar (Millones de tmvc)	2,39	2,37	2,11	2,23

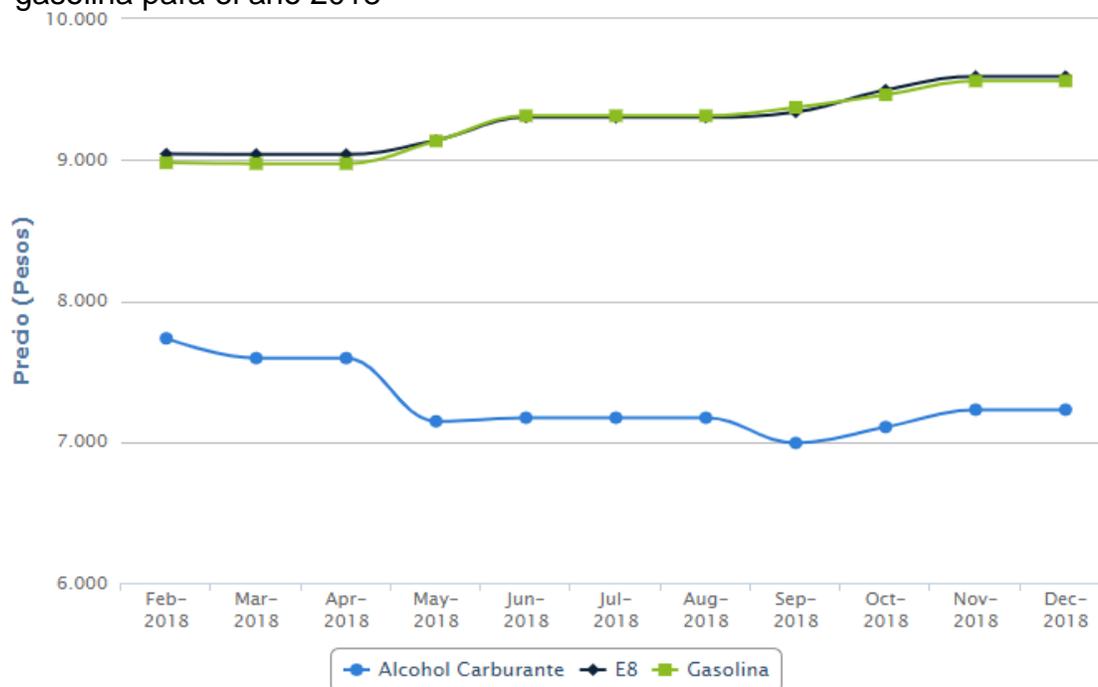
Nota: tmvc hace referencia a Tonelada métrica de volumen crudo

Fuente: FEDERACIÓN NACIONAL DE BIOCOMBUSTIBLES DE COLOMBIA. Información estadística sector biocombustibles. [En línea]. [Consultado el Nov 11,2018]. Disponible en: [http://www.fedebiocombustibles.com/estadistica-mostrar_info-titulo-Alcohol_Carburante_\(Etanol\).htm](http://www.fedebiocombustibles.com/estadistica-mostrar_info-titulo-Alcohol_Carburante_(Etanol).htm)

Según la información anteriormente presentada, el mercado creció hasta el año 2016, para el 2017 debido a la crisis económica debido a los problemas políticos de Venezuela (exportador de crudos para combustibles fósiles)³⁹ disminuyó la venta, la producción de etanol, aunque el área sembrada sigue creciendo aun en el 2017.

En la Figura 2 se puede observar el cambio de precios que ha tenido las mezclas sin etanol, las mezclas de etanol al 8% v/v (E8) y el etanol carburante ha sido de manera impredecible, mientras los costos de la gasolina pura ha ido en aumento, llega a un punto de equilibrio con la mezcla E8, mientras que el costo del etanol carburante ha disminuido, esto se debe a la investigación de las tecnologías presentes para la producción en masa de este producto, ya sea por la adición de tecnologías de intercambio iónico (como la destilación extractiva con uso de sales) u otras tecnologías como las oscilaciones de presión o la misma destilación extractiva simple, no solo en el método, también en el esquema de producción por columnas térmicamente acopladas o de pared dividida.

Figura 2. Comportamiento económico del etanol carburante, mezcla E8 y gasolina para el año 2018



Fuente: FEDERACIÓN NACIONAL DE BIOCOMBUSTIBLES DE COLOMBIA. Información estadística sector biocombustibles. [En línea]. [Consultado el Ene 2,2019]. Disponible en: [http://www.fedebiocombustibles.com/v3/estadistica-precios-titulo-Alcohol_Carburante_\(Etanol\).html](http://www.fedebiocombustibles.com/v3/estadistica-precios-titulo-Alcohol_Carburante_(Etanol).html)

³⁹ FEDERACIÓN NACIONAL DE BIOCOMBUSTIBLES DE COLOMBIA. Información estadística sector biocombustibles. [En línea]. [Consultado el Ene 2,2019]. Disponible en: [http://www.fedebiocombustibles.com/v3/estadistica-precios-titulo-Alcohol_Carburante_\(Etanol\).htm](http://www.fedebiocombustibles.com/v3/estadistica-precios-titulo-Alcohol_Carburante_(Etanol).htm)

1.2 DESTILACIÓN EXTRACTIVA

La problemática de purificación del etanol anhidro ha sido estudiada exhaustivamente desde su descubrimiento como un aditivo en los combustibles de motores de combustión por gasolina, tanto a nivel internacional como a nivel nacional, dicha investigación ha resultado en el estudio del comportamiento energético con diferentes solventes⁴⁰, seguido del estudio exergético y de segunda ley para un esquema tecnológico utilizando etilenglicol como entrainer con el objetivo de cuantificar la pérdida energética⁴¹, hasta el presente proyecto, analizar termo económicamente dicho esquema tecnológico como un pivote a la optimización térmica.

La destilación extractiva es un método de separación no convencional que combina el uso de un agente energético de separación (proporcionado por un rehedidor) y un agente material de separación llamado *entrainer*, arrastrador, solvente, entre otros muchos más⁴². El agente energético permite el contacto íntimo de las fases líquida y gaseosa generando un equilibrio de fases que permite la separación de un componente ligero y uno pesado bajo un corte de especies, por otra parte, el agente material de separación debe cumplir con la regla de ser el componente con la menor volatilidad relativa o en otras palabras el punto de ebullición más alto de los tres componentes⁴³ además de no generar azeotrópica con ningún componente del sistema⁴⁴.

El resultado del uso de la destilación extractiva en sistemas que tienen limitantes termodinámicas es la obtención de composiciones superiores a la azeotrópica, en este caso composiciones mayores al 90% de etanol en base molar de la mezcla etanol agua⁴⁵. El estudio topológico de la mezcla etanol agua con etilenglicol como entrainer muestra la idea anteriormente mencionada, esta será consultada en el posterior ítem.

Generalmente el esquema tecnológico para la destilación extractiva consta de dos torres de destilación⁴⁶, la primera, donde se realiza la destilación extractiva (la cual es llamada torre extractiva) y la segunda torre de recuperación de entrainer, el cual

⁴⁰ LOPEZ N, Derly L., Evaluación energética de esquemas tecnológicos para la producción de etanol anhidro por destilación extractiva, 2017 p. 30-40.

⁴¹ TOVAR Op. Cit. p. 15-26.

⁴² TREYBAL, Robert E. Operaciones de transferencia de masa (2a. ed.). México: McGraw-Hill Interamericana, 2000. ISBN 9789686046342 p. 507-508

⁴³ MORA, Maza and ALBERTO, Luis. Implementación del control para la destilación extractiva de la mezcla propano-propileno usando ASPEN PLUS DYNAMICS. 2017 p.02-14.

⁴⁴ UYAZÁN, et al. Deshidratación de etanol, Universidad Nacional de Colombia., Universidad Nacional de Colombia, 2004.

⁴⁵ UYAZÁN Ibid. pp.49

⁴⁶ UYAZÁN, Ana María, et al. Producción de alcohol carburante por destilación extractiva: simulación del proceso con glicerol. 2010. p. 5-6

junto a un *make-up*, es el alimento a la torre anteriormente mencionada, esto con el fin de mantener el sistema en un estado estacionario y no pasar a un estado dinámico⁴⁷.

1.2.1 Termodinámica y topología. El sistema que estará inmerso en la destilación extractiva en el presente proyecto es el de etanol agua etilenglicol, según los estudios bibliográficos, la mezcla etanol agua tiene un azeótropo de bajo punto de ebullición al 90% molar de etanol de pureza⁴⁸, Al ser una mezcla de 2 compuestos orgánicos (un alcohol y un glicol) y agua se puede deducir que se trata de una mezcla polar no electrolítica (debido a que no genera aniones ni cationes que alteren el equilibrio), dado que las torres operaran a presión atmosférica (1,013 bar) y siguiendo el árbol de decisiones propuesto por Carlson junto a la revisión literaria del paquete termodinámico para la simulación de la mezcla, se decide utilizar un modelo híbrido actividad-fugacidad para predecir el sistema correctamente, para la fase líquida se utilizara el modelo de actividad (γ) Non Random Two Liquids-NRTL para predecir las no idealidades y para la fase gaseosa se utilizara la ecuación de estado (ϕ) Redlich kwong-RK⁴⁹. El uso de un modelo híbrido no tiene más que el objetivo de disminuir el error de predicción por la fase de vapor y la probabilidad de generar heterodímeros y heterotrímeros en el caso del azeótropo etanol agua⁵⁰.

Por un sistema de destilación convencional (sin entrainer o cambios de presión) se puede llegar a obtener como máximo el 90% de pureza⁵¹, esto puede evidenciarse en un equilibrio de fases (x vs y) como el mostrado en la Figura 3, donde la línea punteada que forma 45° con el origen muestra un comportamiento donde la composición de líquido y de vapor lineal (o en otras palabras, un problema de azeotropía), la línea del equilibrio (círculos rojos) muestra un comportamiento azeotrópico a una composición de 90% molar de etanol, corroborando las anteriores ideas, en otras palabras, si una mezcla de etanol agua se destilara a composiciones menores al 90%, se obtendría una mezcla de etanol agua en composición azeotrópico y agua pura. De manera análoga, para mezclas de composición superior al 90% molar de etanol, se obtendría etanol anhidro y una mezcla de etanol anhidro. Debido a la problemática de abarcar soluciones por encima o por debajo del punto azeotrópico, se tomará como base de cálculo una solución en punto azeotrópico para la respectiva simulación del esquema tecnológico.

⁴⁷ SARNO, D. Evans. Acetonitrile as an Extractive Distillation Solvent. World Petroleum Congress, 1967. p. 36-37

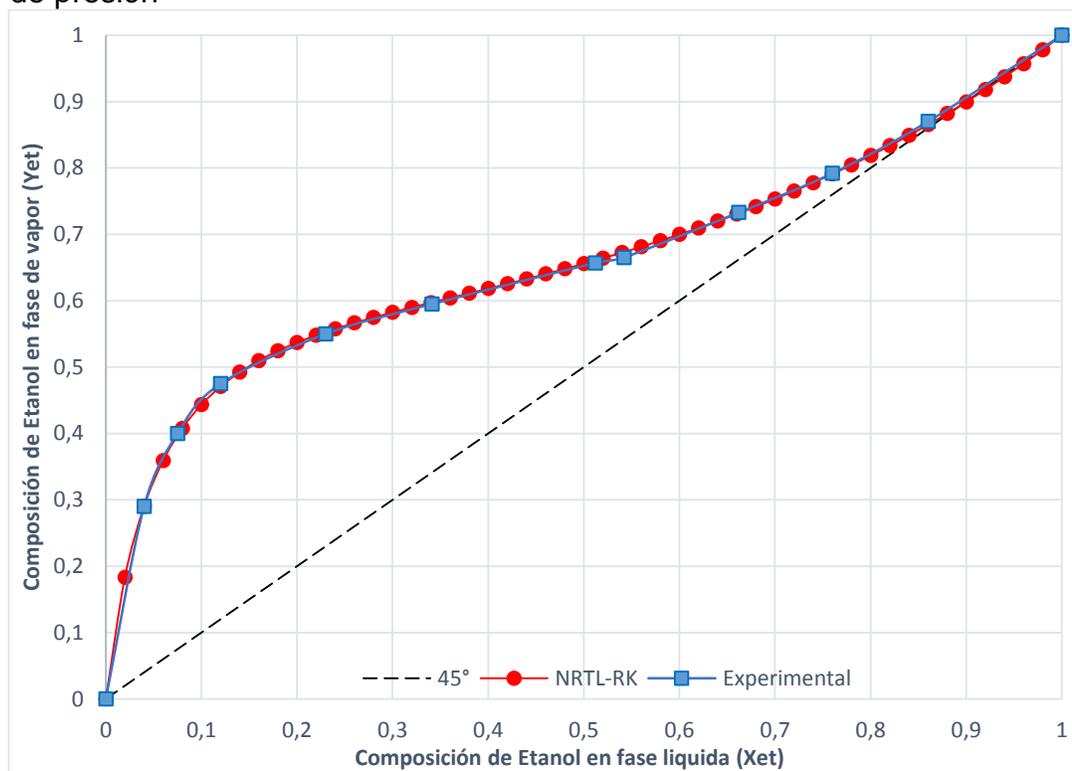
⁴⁸ VÁSQUEZ, Cesar, et al. Producción de etanol absoluto por destilación extractiva combinada con efecto salino. 2007 en: DYNA. Mar 1, .vol. 74, no. 151, p. 53-59

⁴⁹ CARLSON, Eric C. Don't gamble with physical properties for simulations, Chemical Engineer. Chemical engineering progress. Octubre, 1996,

⁵⁰ MEJIA, Sol M., Espinal, Juan F. y Mondragon, Fanor. Estudio del azeótropo etanol-agua. Caracterización molecular de dímeros de etanol, heterodímeros y heterotrímeros de etanol-agua. Octubre, 2006. p.6-8

⁵¹ TREYBAL Op. Cit. p. 509

Figura 3. Equilibrio isobárico de fases para el sistema Etanol-Agua a 1 atm de presión



Fuente: Elaboración propia

Al comparar el equilibrio de fases modelado con NRTL-RK con los datos experimentales⁵² se puede concluir que es un modelo apropiado, esto teniendo en cuenta que los datos obtenidos por los equilibrios son muy cercanos a los mostrados en literatura, estos datos pueden ser encontrados en el Anexo A. Al añadir el entrainer, el equilibrio es alterado de tal manera que el azeótropo se desplace hasta el punto de no existir, para esto, es de suma importancia observar el comportamiento del equilibrio al añadir diferentes cantidades de solvente con relación al alimento, por tal motivo, es importante definir la variable de proporción solvente alimento o relación S/F⁵³, con esto, se pueden construir nuevos diagramas xy que son útiles para observar el efecto de un tercer componente de una solución binaria, estos son llamados pseudoequilibrios binarios⁵⁴, estos son construidos en

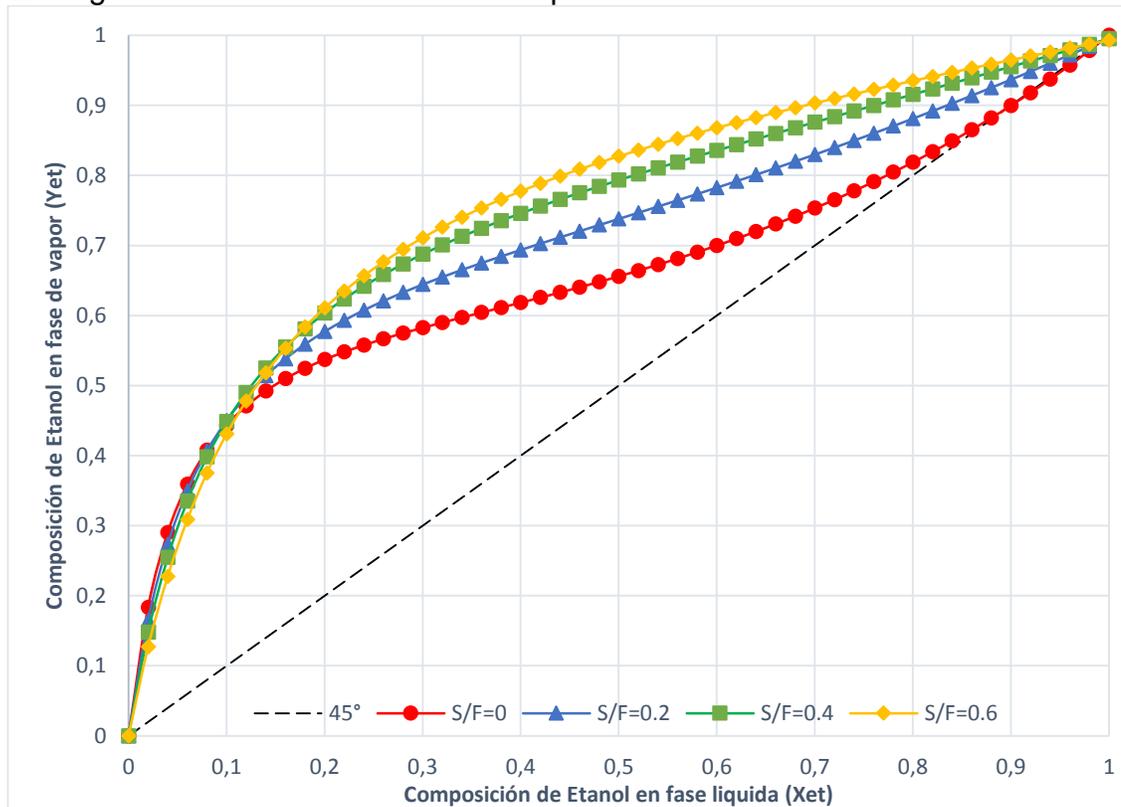
⁵² RAO, C. V.; Achary, M. V. R.; Narasinga Rao, M. Trans., Indian Inst. Chem. Eng., 1948, 2, 6-15 Vapour-liquid equilibria of non-ideal solutions: II alcohol -water

⁵³ SEADER, Junior D.; HENLEY, Ernest J. and ROPER, Donald Keith. Separation process principles. 3. ed ed. Hoboken, N.J: Wiley, 2011.

⁵⁴ SARKHEL, Debarati, et al. Studies on separation characteristics and pseudo-equilibrium relationship in pervaporation of benzene-cyclohexane mixtures through composite PVA membranes on PAN supports. 2003. En: SEPARATION AND PURIFICATION TECHNOLOGY. vol. 30, no. 1, p. 89-96

base libre de solvente, siendo una manera eficaz y pertinente de observar el desplazamiento del azeótropo, Como lo muestra la Figura 4, al añadir el 20% de etilenglicol, el azeótropo se desplaza significativamente y supera la limitante termodinámica.

Figura 4. Pseudo-Equilibrio isobárico para el sistema Etanol-Agua con Etilenglicol como entrainer a 1 atm de presión



Fuente: Elaboración propia

Siendo S/F, la relación de solvente por cada mol de solución problema, como se puede observar, la línea roja, representa el comportamiento del sistema sin añadir algún solvente, a medida que crece la relación de solvente (de forma creciente línea azul triangular, verde cuadrada y por último amarilla romboide).

1.2.2 Entrainer comúnmente usados para el sistema Etanol Agua. Aunque los equilibrios de fases anteriormente presentados estén modelados con etilenglicol ($C_2H_6O_2$) como entrainer, también existen otros solventes que pueden cambiar el método no convencional y el esquema tecnológico como tal⁵⁵, como primera medida, se debe destacar que dependiendo el entrainer se puede hacer

⁵⁵ LAUZURIQUE G., Yeney et. al., Procesos de separación en la producción de etanol anhidro, Octubre, 2013. DOI: 10.13140

deshidratación de etanol por destilación extractiva o azeotrópica⁵⁶, aunque la destilación extractiva tiene mayor uso porque generalmente los entrainers utilizados son subproductos de reacciones (como lo puede ser el glicerol), además de disminuir riesgos por toxicidad⁵⁷.

Aunque el enfoque de este proyecto, es el uso de destilación extractiva, se considera de gran importancia el conocimiento de otros entrainers que puedan hacer la deshidratación posible. Por tal motivo, en el Cuadro 5 se muestran algunos entrainers que se pueden encontrar en la literatura para la obtención de etanol carburante.

Cuadro 5. Algunos métodos para la obtención de etanol anhidro por diferentes destilaciones no convencionales

Entrainer	Tipo destilación	Autor	Comentario
Ciclohexano	Azeotrópica Heterogénea	Kiss & Suszwalak ⁵⁸	Entrainer que tiene más afinidad para la extracción de aceites que para deshidratación de etanol.
Benceno	Azeotrópica Heterogénea	Chianese, Zinnamosca ⁵⁹	El benceno es cancerígeno y toxico, por ende, no es recomendable estas plantas por problemas con entornos sociales.
Glicerol	Extractiva	Gil et al. ⁶⁰	El glicerol es un subproducto del proceso de obtención de biodiesel por interestificación de aceites, actualmente es el entrainer mas investigado para este efecto.

⁵⁶ LOPEZ Op. Cit. p. 35-39

⁵⁷ DE FIGUEIRÊDO, Marcella Feitosa, et al. Optimal design of extractive distillation columns—A systematic procedure using a process simulator. 2011 En: CHEMICAL ENGINEERING RESEARCH AND DESIGN. March 1, .vol. 89, no. 3, p. 341-346

⁵⁸ KISS, Anton A. y Suszwalak, David J-P C. Enhanced bioethanol dehydration by extractive and azeotropic distillation in dividing-wall columns. 2012 En: SEPARATION AND PURIFICATION TECHNOLOGY. February 15, .vol. 86, p. 70-78

⁵⁹ CHIANESE, A. y ZINNAMOSCA, F. Ethanol dehydration by azeotropic distillation with a mixed-solvent entrainer. En: THE CHEMICAL ENGINEERING JOURNAL. 1990 April 2, .vol. 43, no. 2, p. 59-65

⁶⁰ GIL Op. Cit. p. 259-270

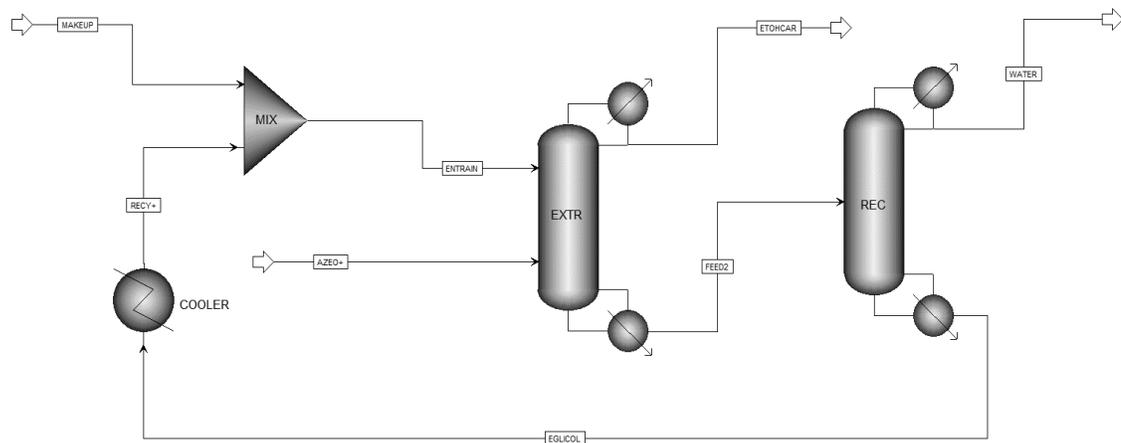
Cuadro 5. Continuación

Entrainer	Tipo destilación	Referencia	Comentario
Etilenglicol	Extractiva	Nguyen et al. ⁶¹	Entrainer tradicional para la deshidratación de etanol anhidro.
Líquidos iónicos	Extractiva Iónica	Figueroa et al. ⁶²	Investigación actual debido a las limitantes en la predicción de equilibrios con un agente generador de aniones y cationes.

Fuente: Elaboración propia

1.2.3 Esquema tecnológico empleado. Un esquema tecnológico es una representación gráfica de todos los equipos de operación en un proceso químico⁶³, en la Figura 5 se puede observar el esquema tecnológico empleado para el proceso de deshidratación de etanol anhidro⁶⁴, éste consta de una torre de destilación extractiva donde se obtendrá el etanol anhidro como producto, una torre de recuperación en donde se purificará agua y etilenglicol (*entrainer*) respectivamente, este último se recirculara y se mezclara junto al *make up* para ser la alimentación de entrainer a la torre.

Figura 5. Esquema de destilación extractiva propuesta para el análisis termo económico



Fuente: TOVAR C., Nataly T., Análisis exergético y de segunda ley del esquema tecnológico para la producción de etanol anhidro por destilación extractiva, 2019 p. 52

⁶¹ NGUYEN, Nghi; SIM, Jiwon y DEMIREL, Yaşar. Bioethanol dehydration in thermally integrated extractive distillation columns. 2010.

⁶² FIGUEROA, J. J., et al. Improvements on Anhydrous Ethanol Production by Extractive Distillation using Ionic Liquid as Solvent. 2015 _ PROCEDIA ENGINEERING. January 1, vol. 42, p. 1016-1026

⁶³ CALAMEO, Procesos Tecnológicos – Diagrama de flujo. [Consultado Nov 23, 2018] Disponible en: <https://es.calameo.com/books/0004234123d156d5e675a>

⁶⁴ TOVAR Op.Cit. p.54-55

1.3 TERMOECÓNOMIA

Este concepto nace desde la definición mecánica de entropía, la cual es enunciada en la segunda ley de la termodinámica. La entropía puede ser definida como la cantidad de trabajo perdido por interacciones con el entorno de un sistema, y, por consiguiente, tiene implícito un término de más utilidad, este es la *Exergía*. La exergía es una medida de la eficiencia de la energía que compete en el sistema. Según la termodinámica es muy común de hablar de la energía que transita en el sistema, ya sea por altura, velocidad, temperatura y/o presión⁶⁵; Las cuales son determinadas por la energía potencial, energía cinética y entalpia respectivamente; Así mismo como los consumos o producción de energía en forma de trabajo o calor, pero poco se habla sobre la cantidad útil de la totalidad de energía que transita por el sistema.

Un ejemplo típico de lo anteriormente mencionado es un ciclo refrigerante, se sabe que este funciona por la entrega de calor en una caldera y el ceder calor en un condensador⁶⁶, según la termodinámica es muy común hablar de una eficiencia térmica la cual es una relación entre el trabajo neto y el calor suministrado por medio de un sumidero⁶⁷. Esta es una aproximación muy común en el ámbito ingenieril y es que, realmente, la eficiencia carnotiana (la cual desde este momento se conocerá como eficiencia de primera ley y denotada por el símbolo η_I) es una medida de la transformación de calor en trabajo⁶⁸, esto significa que esta medida no tiene en cuenta que tanto trabajo toma el sistema y se convierte en trabajo útil; En otras palabras, es la cantidad de calor que se transformó en trabajo ideal. La eficiencia de primera ley puede ser calculada bajo la siguiente expresión:

Ecuación 1. Eficiencia de primera ley o eficiencia carnotiana

$$\eta_I = \frac{W_{reversible}}{Q_{suministrado}} \quad [Adim]$$

Fuente: MORAN, Michael J., et al. *Fundamentals of Engineering Thermodynamics*, 8th Edition. 8th ed. New York: JW Wiley, 2014.

Siendo η_I la eficiencia de primera ley, $W_{reversible}$ el trabajo ideal que genera la maquina térmica y $Q_{suministrado}$ el calor suministrado por el sumidero de calor. Este término se puede interpretar bajo el concepto de la energía que entrega al sistema de un suministro por calor. El término exergía junto a la eficiencia de segunda ley

⁶⁵ MORAN, Michael J.; SHAPIRO, Howard N. and BOETTNER, Daisie D. *Princípios de termodinâmica para engenharia* (7a. ed.). 2008 São Paulo: Grupo Gen - LTC, 2013. ISBN 8521622120

⁶⁶ MORAN Ibid. p. 473

⁶⁷ JIMÉNEZ B., José Alfredo and GUTIÉRREZ T., Claudia del Carmen. *Termodinámica*. México, D.F: Grupo Editorial Patria, 2014. ISBN 6074380597

⁶⁸ VAN WYLEN, Gordon J.; BORGNAKKE, Claus y SONNTAG, Richard Edwin. *Fundamentals of classical thermodynamics*. 4. ed. edit. New York Wiley Sons, 1994. ISBN 9780471593959

puede brindar mayor información sobre el enfoque de un equipo, y es el desempeño de uso de energía de la total, o, en otras palabras, que cantidad de energía de toda la entregada es útil⁶⁹.

1.3.1 Energía. La energía se puede definir como el potencial total de ejecutar alguna acción, esta puede ser definida por ciertas variables como lo es la altura, la velocidad, la temperatura y la presión⁷⁰. Siendo estas últimas dos de gran importancia para cualquier proceso, estas son más conocidas como variables de estado. Para una corriente de materia conocida, conociendo estas dos variables, se puede conocer el resto de propiedades de la misma, en otras palabras, hallando la energía de dicha corriente⁷¹. Esto acatando los grados de libertad de fases propuesto por Gibbs.

Ecuación 2. Definición termodinámica de entalpía

$$h(T, P) = u(T) + Pv(T) \quad \left[\frac{GJ}{h} \right]$$

Fuente: CENGEL, Yunus A. y BOLES, Michael A., Termodinámica, 8va Edición. 8th ed. Mc Graw Hill, 2014.

Siendo h la entalpía molar específica, u la energía interna del sistema, P la presión y v el volumen específico del fluido. La entalpía puede aproximarse bajo la idea anterior a la energía del sistema, esta no es una aproximación del todo mal, por que como antes se explico es una función de las dos variables de estado fundamentales⁷², siendo así mismo una función de la energía interna del sistema la cual es función de la temperatura y del volumen específico (la cual es implícitamente también función de la temperatura). Pero la pregunta que siempre existirá es, de toda la energía que contiene una corriente. ¿Cuál es la cantidad que está disponible?

La inquietud que siempre interviene al momento de analizar termodinámicamente un sistema es la de cuantificar la verdadera cantidad de trabajo útil de toda la entalpía. Esta inquietud es una pregunta que en un primer acercamiento contiene una respuesta más allá de una interacción por fenómenos de transporte, un primer acercamiento nos la enuncia la segunda ley de la termodinámica, y es a la interacción de esa corriente de materia con un medio, esto lo explica con más detenimiento la entropía.

⁶⁹ MORAN Op cit. p. 564

⁷⁰ ÇENGEL, Yunus A. and BOLES, Michael A. Termodinámica (8a. ed.). Mexico City: McGraw-Hill Interamericana, 2015. p. 351-356

⁷¹ LEVINE, Ira N. Principios de fisicoquímica (6a. ed.) 2013. México, D.F: McGraw-Hill Interamericana, 2014.

⁷² LEVINE, Ibid. p. 350

1.3.2 Entropía. Aunque esta propiedad tiene infinidad de conceptos, para la aplicación de la Termodinámica es la cantidad de energía que es desperdiciada al encontrarse a una temperatura⁷³. La entropía junto a la entalpía son las dos variables fundamentales para el cálculo de la función trabajo o mejor llamada exergía. La entropía puede ser calculada mediante la siguiente ecuación siendo s la entropía, q el calor específico obtenido por un balance de energía y T la temperatura en unidades absolutas.

Ecuación 3. Definición termodinámica para la entropía

$$\Delta s = \int \frac{\delta q}{T} \quad \left[\frac{GJ}{h K} \right]$$

Fuente: CENGEL, Yunus A. y BOLES, Michael A., Termodinámica, 8va Edición. 8th ed. Mc Graw Hill, 2014.

1.3.3 Exergía. Según la teoría del equilibrio, un sistema muestra su mínima pérdida de energía cuando éste alcanza un equilibrio térmico, mecánico y material junto al entorno⁷⁴, gracias al anterior enunciado, se genera el término estado muerto. El estado muerto es un punto donde se maximiza el trabajo útil y se minimiza el desperdicio de energía, en otras palabras, un sistema maximiza el trabajo útil cuando alcanza el equilibrio con el entorno que lo rodea. Por ende, el estado muerto corresponde a las condiciones de presión y temperaturas del ambiente. Deduciendo la expresión, la exergía puede ser calculada por la diferencia de la energía total (entalpía) y el trabajo perdido (entropía). La exergía puede resumirse como la cantidad de energía útil que tiene una corriente cuando está a una temperatura y una presión determinada⁷⁵.

Ecuación 4. Definición termodinámica de la exergía

$$Ex = (h - h_o) - T_o(s - s_o) \quad \left[\frac{GJ}{h} \right]$$

Fuente: MORAN, Michael J., et al. Fundamentals of Engineering Thermodynamics, 8th Edition. 8th ed. New York: JW Wiley, 2014.

Siendo h la entalpía de la corriente, s la entropía, T la temperatura y el subíndice o la propiedad en su estado muerto. Así como para la entropía existe un principio de aumento en la generación de entropía, existe un término análogo en la exergía, este es conocido como la exergía destruida, la cual tiene un principio de disminución el cual es proporcional a la generación de entropía con la interacción del estado muerto⁷⁶, como se muestra a continuación:

⁷³ SILVA L., Jorge R. La termodinámica como alternativa para mejorar la competitividad industrial. 2015 en: CRITERIO LIBRE., vol. 12, no. 21, p. 97

⁷⁴ CENGEL, Yunus A. y BOLES, Michael A., Termodinámica, 8va Edición. ed. Mc Graw Hill, 2014. p. 157

⁷⁵ CENGEL Op. Cit. p.450.

⁷⁶ VAN WYLEN Op cit. p. 750

Ecuación 5. Relación entre exergía destruida y entropía generada

$$Ex_{dest} = T_o S_{gen} \quad \left[\frac{GJ}{h} \right]$$

Fuente: MORAN, Michael J., et al. Fundamentals of Engineering Thermodynamics, 8th Edition. 8th ed. New York: JW Wiley, 2014.

Siendo Ex_{dest} la exergía destruida, T_o la temperatura del estado muerto y S_{gen} la entropía generada, todas las anteriores obtenidas a partir de un balance de energía.

1.3.4 Análisis Termoecónómico. La inclusión de la exergía como potencial de energía útil, es el primer paso para la incluir el termino de termoecónomia. Esta es una disciplina que incluye la utilidad energética junto a la economía para la predicción de costos, en otras palabras, es una herramienta que puede ayudar con el uso y la distribución de recursos de carácter energético en un proceso en particular⁷⁷. Una herramienta como esta llega a ser la respuesta a un modelo que se encargue de estudiar el ahorro de energía, esto basado en modelos de carácter exergético.

En una primera vista, los estudios termo económicos son desarrollados con base es dos orientaciones⁷⁸:

1. Para la **Optimización del diseño, operación y/o mantenimiento** de un sistema energético, donde el objetivo generalmente es disminuir el costo unitario de la exergía del producto, con esto limitando la pérdida de energía
2. Para la **Determinación del costo** de todas las corrientes externas del proceso, en otras palabras, establecer el precio de las corrientes más importantes del sistema, las eficiencias y destrucción exergética de cada equipo, con base a la viabilidad del proyecto.

El enfoque de un análisis termo económico, recae en la determinación de los costos de los flujos exergéticos, en otras palabras, la determinación del costo de la energía útil que se le suministra al sistema, así mismo como las pérdidas (destrucciones de exergía)., estos costos pueden ser determinados bajo un balance económico en el cual están relacionados los costos de insumos, los costos del producto y los costos de mantenimiento⁷⁹; tal como se muestra a continuación:

⁷⁷ SILVA Op cit. p. 12

⁷⁸ SILVA L, Jorge René. La termoecónomia como alternativa para mejorar la competitividad industrial, 2016. p. 15-16

⁷⁹ SILVA Ibid p. 17

Ecuación 6. Balance de insumos para un equipo

$$\sum_{i=1}^n \pi_{i,productos} = \sum_{i=1}^n \pi_{i,insumos} + Z \quad \left[\frac{U\$}{s} \right]$$

Fuente: SILVA L, Jorge René. La termoeconomía como alternativa para mejorar la competitividad industrial. 2015. p. 15-16

Donde π es el costo termoeconómico por unidad de tiempo de una corriente, Z el costo de mantenimiento del equipo ambos medidos en U\$/h, la Ecuación 6 hace referencia a que el costo de la energía utilizado para producir la corriente de productos, debe ser igual que el consumo energético y el mantenimiento del equipo, esta ecuación no hace referencia a una utilidad neta, el costo de cada corriente puede ser calculado como el producto de la exergía de la corriente y el precio específico exergético:

Ecuación 7. Costo unitario de energía util

$$C_i = F_i Ex_i c_i \quad \left[\frac{U\$}{s} \right]$$

Fuente: SILVA LARROTTA, Jorge René. La termoeconomía como alternativa para mejorar la competitividad industrial. 2015. p. 15-16

Donde c es el costo específico exergético en U\$/s y Ex la exergía de la corriente i en GJ/kmol y F es el flujo molar de la corriente i en kmol/h, dado que el enfoque de este trabajo de grado es con base a una torre de destilación extractiva, la exergía física es la única que se tiene en cuenta para el sistema, la exergía química por otra parte, no es útil dado que en el sistema no contempla ningún tipo de reacción química.

1.4 OPTIMIZACIÓN

La optimización es un concepto que fue introducido en las siguientes décadas de la revolución industrial, dicho concepto impulso a las industrias de esa época a ser competitivas y obtener un mercado más estable⁸⁰. Optimizar un proceso puede tener una variedad de definiciones, una de ellas es la modificación de las condiciones de operación, con ello, se ejecute de la mejor manera un proceso sujeto bajo la minimización/maximización de una función objetivo y diversas restricciones dependiendo él área de aplicación.

⁸⁰ ESQUIVEL, S. C.; FERRERO, S. W. and GALLARD, R. H. Parameter Settings and Representations in Pareto-Based Optimization for Job Shop Scheduling. 2002 En: CYBERNETICS AND SYSTEMS. September 1, .vol. 33, no. 6, p. 559-578

Actualmente el uso de la palabra optimización es muy utilizada, aunque incorrecta, cuando se habla de una optimización, se debe tener como idea directa un proceso monetario, ya sea por mayor producción, disminución de energía utilizada, o rediseño de equipos para menor inversión⁸¹. En otras palabras, la naturaleza de un problema de optimización debe tener como idea directa en su función objetivo un parámetro económico, ya sea con ecuaciones que tengan parámetros económicos definidos⁸² (como lo puede ser el costo total anualizado TAC) o con variables que tengan indirectamente costos (como lo pueden ser insumos, servicios de calentamiento o enfriamiento, entre otras).

Un problema de optimización se diferencia de otros problemas por tener una función objetivo, como se mencionó anteriormente, esta debe contar una función económica directa o indirecta⁸³, Además, se debe saber la naturaleza del problema, esto hace referencia a si la función objetivo se quiere maximizar o minimizar⁸⁴, el uso de los signos es un papel clave para una función objetivo la cual quiera ser objeto de una multi-optimización y por ultimo las restricciones, todo problema debe estar sujeto a una o más expresiones las cuales restringen los valores de las variables de la función objetivo a ciertos valores. Estas pueden ser ecuaciones (como lo es balances de materia, energía, exergía, entropía, transferencia de calor, entre otros), como inecuaciones (Composición mínima/máxima, cantidad máxima a utilizar, precio mayor/menor a)⁸⁵.

No todos los problemas de optimización se solucionan de la misma manera, dependiendo si el sistema de optimización (función objetivo y restricciones) sean lineales o no⁸⁶, para los sistemas lineales, la solución puede acotarse a soluciones graficas o algoritmos de matrices como lo puede ser el método simplex, en cambio, para modelos no lineales, existen diversos modelos dependiendo de la complejidad del sistema y de la función objetivo. Algunos modelos que contienen solo una variable a optimizar utilizan el método del cálculo clásico de derivadas de orden superior, para modelos los cuales precisan de más de una variable a optimizar y ecuaciones dependientes de orden superior (como balances de energía) requieren capacidades de cálculo más amplias. La solución para esto es el uso programación por medio computacional⁸⁷.

⁸¹ CUI,Wenzhi; ZHOU,Shiyu and LIU,Xiangyang. Optimization of design and operation parameters for hybrid ground-source heat pump assisted with cooling tower. 2015 En: ENERGY & BUILDINGS. Jul 15,.vol. 99, p. 253-262

⁸² DE FIGUEREIDO Op Cit. p. 15

⁸³ TAHA, Hamdy. Investigación De Operaciones. 7ma ed. Pearson Educación de México, S.A. de C.V, 2011.

⁸⁴ NOCEDAL, Jorge and WRIGHT, Stephen J. Numerical optimization. 2001. New York.

⁸⁵ DE FIGUEREIDO Op Cit. p. 15

⁸⁶ EDGAR, Thomas F.; HIMMELBLAU, David Mautner and LASDON, Leon S. Optimization of chemical processes. 2. ed. edit. Boston: McGraw-Hill, 2001.

⁸⁷ TAHA Op Cit. p. 149

En este caso, al realizar los cálculos en un simulador, puede facilitar y compactar los cálculos. El simulador ASPEN cuenta con el modelo de optimización de Programación secuencial cuadrática (SQP)⁸⁸, el cual es un algoritmo basado en los multiplicadores de Laplace asistida de las condiciones Karush Kunh Tukker (KKT). Este modelo funciona con una aproximación de la función objetivo a un modelo cuadrático en donde se busca un máximo global o local de la función⁸⁹, este puede ser modelado matemáticamente bajo la expresión:

Ecuación 8. Función Multiplicadores de lagrange

$$L(x_i, \sigma_i, \mu_i) = K(x) + \sum_{i=1}^n \sigma_i \mu_i \quad [\text{Adim}]$$

Fuente: TAHA, Hamdy. Investigación De Operaciones. 7ma ed. Pearson Educación de México, S.A. de C.V, 2011.

Donde L es la función Langreana la cual se conoce como función principal, K es la función objetivo (función de las variables a optimizar), σ_i es el multiplicador de lagrange para la restricción i y μ_i es la restricción i del sistema. Esta función Langriana es derivada parcialmente para cada variable a optimizar e igualada a 0, esto genera un sistema de ecuaciones en donde la solución será el punto óptimo, esto vectorialmente significa una pendiente de superficie igual a 0, donde se obtiene el punto máximo o mínimo. La verificación puede ser hecha por una superficie de respuesta o por el cálculo de una matriz hessiana acotada.

⁸⁸ SCHEFFLAN, Ralph. Teach Yourself the Basics of Aspen Plus. Second edition. ed. US: AIChE/Wiley Press, 2016. ISBN 9781118980590

⁸⁹ CUI, Op. Cit. 99, p. 253-262

2. ESQUEMA TECNOLÓGICO DE DESTILACIÓN EXTRACTIVA

Un esquema tecnológico es una representación gráfica de los equipos involucrados en un proceso como tal; Para el proceso de obtención de etanol carburante es necesario el uso de dos columnas de destilación (una de extracción con doble alimentación y una de alimentación simple), un mezclador, un intercambiador de calor con servicios de enfriamiento y una bomba como lo muestra la Figura 5 presentado en la sección 1.2.3.

La primera medida que se debe asegurar al momento de simular es mantener los grados de libertad en cero (o en un sistema especificado)⁹⁰, o en otras palabras que no falten variables, suposiciones o relaciones que se deben especificar en el diseño del proceso. Esto puede cambiar cuando el sistema tenga presencia de recirculaciones, cuando pasa esto, es necesario especificar una corriente de corte y un equipo de corte; Algunos autores también les llaman corrientes y equipos de iteración inicial⁹¹.

Cuando el sistema tiene presencia de una corriente y equipo de corte, se requieren múltiples iteraciones para llegar un resultado que satisfaga las tolerancias propuestas, así como los grados de libertad. Generalmente estas son escogidas al parametrizar algunas variables para que el proceso (disminuyendo los grados de libertad).

A continuación, se mostrará el cálculo de grados de libertad para cada equipo del sistema y así mismo para el sistema global.

2.1 EQUIPOS DE TRANSFERENCIA DE MASA

Los equipos de transferencia de masa son aquellos donde se generan cambios de concentración⁹². En este caso, son dos torres de destilación, una de destilación extractiva la cual tiene como producto principal el etanol carburante, y una torre de destilación de recuperación de solvente, la cual separará la mayor cantidad de solvente del agua, solvente que será re utilizado y mezclado junto a un *make up* (suministro de solvente), con el objetivo de mantener la cantidad de solvente dentro del sistema constante, esto es dependiente a la relación S/F.

2.1.1 Torre de destilación extractiva. En el anterior capítulo se mencionó que la característica distintiva para las torres de destilación extractivas es su doble alimentación, estas dos corrientes pueden resumirse en una corriente de solvente y

⁹⁰ GIL C., Iván Darío, et al. Process Analysis and Simulation in Chemical Engineering. 1st ed. 2016 ed. Cham: Springer International Publishing, p. 7

⁹¹ GIL Ibid pp. 158

⁹² TREYBAL, Op. Cit. pp. 425-427

otra de mezcla a separar, la ubicación de la alimentación para cada una de estas corrientes es definida por su volatilidad relativa o por su temperatura de ebullición, el objetivo de la torre es que el solvente tenga el mayor contacto íntimo con la solución problema como sea posible⁹³.

Para el proceso en particular, el solvente usado es etilenglicol ($T_{eb@1 atm} = 197.3 \text{ }^\circ\text{C}$) que tendrá un contacto íntimo con la mezcla azeotrópica de Etanol-Agua ($T_{azeo@ 1 atm} = 78.2 \text{ }^\circ\text{C}$), debido a la gran diferencia de temperaturas de ebullición, es conveniente que la mezcla azeotrópica se alimente cerca al rehervidor, mientras que el solvente lo más cercano posible al condensador⁹⁴. Otra variable que es importante de observar es la temperatura de entrada de ambos componentes, como el solvente debe fluir desde lo más alto de la torre por la fuerza de la gravedad es importante que se alimente lo más lejos posible del punto de ebullición⁹⁵, caso contrario para el etanol, el cual, al ser alimentado en la parte inferior de la torre, debe tener una temperatura cercana a la azeotrópica.

Los grados de libertad para una columna de destilación extractiva están dados como lo muestra la Tabla 2.

Tabla 2. Análisis de grados de libertad para la columna de destilación extractiva

Equipo	Especificación	Valor
Torre de destilación extractiva	Flujo calórico por etapa	N_1
	Presión de cada etapa	N_1
	Corriente Alimentación	$C+2$
	Corriente Solvente	$C+2$
	Flujo Alimentación	1
	Flujo Solvente	1
	Numero de Etapas	1
	Presión Rehervidor	1
	Caída presión del rehervidor	1
	Presión condensador	1
	Razón de reflujo	1
	Flujo de destilado	1
Grados de Libertad		$2N_1+2C+12$

Fuente: Elaboración propia con base en SEPARATION PROCESS DESIGN siendo N el número de etapas y C el número de componentes⁹⁶

Los servicios provistos para calentamiento son dados por vapor de caldera (entre alta a media presión) y para el condensador con agua de enfriamiento (15°C a 30°C).

⁹³ TREYBAL Op cit. p. 248

⁹⁴ LOPEZ Op cit. p. 98

⁹⁵ LOPEZ Op. cit. p. 98

⁹⁶ SEADER, Junior D.; HENLEY, Ernest J. and ROPER, Donald Keith. Separation process principles. 3. ed ed. Hoboken, N.J: Wiley, 2011. ISBN 0470481838

2.1.2 Torre de recuperación. De manera análoga, la torre de recuperación tendrá como objetivo lograr la mayor cantidad de separación entre agua y etilenglicol, siendo el agua el componente clave ligero y el etilenglicol el clave pesado. Debido a que la diferencia de puntos de ebullición es mayor a comparación de la anterior torre, generara una torre de menor número de platos y consumo energético. En otras palabras, va a tener menos requerimientos que la torre de destilación extractiva; Esta torre va a ser alimentada por los fondos obtenidos de la columna de destilación extractiva.

Los grados de libertad para la columna de recuperación son mostrados e la tabla 3

Tabla 3. Análisis de grados de libertad para la columna de recuperación

Equipo	Especificación	Valor
Torre de destilación extractiva	Flujo calórico por etapa	N ₂
	Presión de cada etapa	N ₂
	Corriente Alimentación (Fondos Extractiva)	C+2
	Flujo Alimentación	1
	Numero de Etapas	1
	Presión Rehervidor	1
	Caída presión del rehervidor	1
	Presión condensador	1
	Razón de reflujo	1
	Flujo de destilado	1
Grados de Libertad		2N ₂ +C+9

Fuente: Elaboracion propia con base en SEPARATION PROCESS DESIGN siendo N el número de etapas y C el número de componentes ⁹⁷

Para esta columna, los servicios provistos serán por agua de enfriamiento y vapor de alta presión debido al rango de temperaturas de la torre (analizando por heurística la torre debe están en un rango de operación de 197.3 °C y 100 °C)

2.2 EQUIPO DE TRANSFERENCIA DE CALOR

2.2.1 Intercambiador de calor. Los equipos de trasferencia de calor son aquellas encargadas para el enfriamiento y calentamiento y en esquema tecnológico, para este sistema solo se empleará un intercambiador termodinámico sin caída de presión y con temperatura de salida fija⁹⁸, esto facilitará la convergencia del sistema sin alterar la separación de etanol agua por medio de la torre de destilación extractiva.

⁹⁷ SEADER Op cit. p. 260-261

⁹⁸ GIL Op cit. pp. 450

2.3 ESQUEMA GLOBAL

2.3.1 Grados de libertad Al sumar cada uno de los grados de libertad, se puede hacer una estimación de todas las variables requeridas para la simulación, a continuación, se mostrará una tabla comparativa en donde se vera resumida todas las condiciones y suposiciones que se deben hacer para la primera corrida del esquema tecnológico, asi mismo se mostrara un diagrama PFD donde se mostrara el esquema tecnológico con las principales propiedades termodinámicas para el cálculo de termoeconomía, eficiencias de segunda ley y exergía.

La principal idea que se debe tener en cuenta al momento de simular, es programar los estados de referencia (para las propiedades termodinámicas) y los estados ambientales (para los cálculos exergéticos)⁹⁹, para este caso, se tomara cada compuesto como líquido saturado a 25°C y 1 bar, en cambio las propiedades ambientales se tomaran como 20°C y 1 bar. Para el cálculo de estas se utilizarán los módulos de cálculo exergético (Ex) y cálculos de disponibilidad (A). En el próximo capítulo se enfocará y se hará énfasis en la diferencia de ambas propiedades termodinámicas en el siguiente capítulo de termoeconomía.

Tabla 4. Grados de libertad para el esquema tecnológico de destilación extractiva para la producción de alcohol carburante

Equipo	Grados de Libertad	Parámetros*	Suposiciones
Torre de destilación extractiva	$2N_1+2C+12$	$T_{\text{azeo}} = 40^\circ\text{C}$ $P_{\text{azeo}} = 1.013 \text{ bar}$ $X_{\text{etoh}} = 0.85$ $T_{\text{entrainer}} = 80^\circ\text{C}$ $P_{\text{entrainer}} = 1.013 \text{ bar}$ $RR = 0.6$ $D = 85 \text{ kmol/h}$ $N = 24 \text{ Etapas teóricas}$ Entrainer puro	Condensador total Rehervidor parcial Alimento azeo en la etapa 4 Alimento entrainer en la etapa 12 Operación Atmosférica Sin caída de presión Corriente y equipo de corte
Torre de recuperación de solvente	$2N_2+8$	$RR = 0.5725$ $D = 20 \text{ kmol/h}$ $N = 7 \text{ Etapas teóricas}$ Alimentación en plato 5	Condensador total Rehervidor parcial Operación atmosférica Sin caída de presión

⁹⁹ SCHEFFLAN Op cit. p. 430 - 431

Tabla 4. (Continuación)

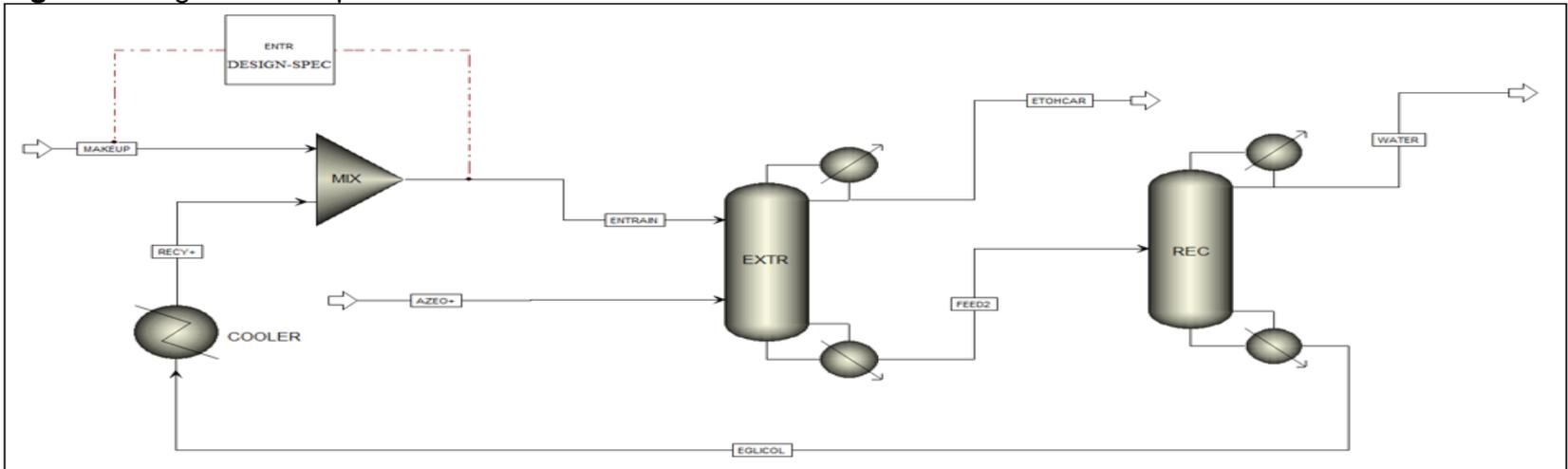
Equipo	Grados de Libertad	Parámetros*	Suposiciones
Intercambiador de calor	2	Tsalida = 80°C Psalida = 1 Atm	Intercambiador de calor ideal, en otras palabras, sin diseño riguroso
Mezclador de solvente	C+2	Xetilenglicol = 1 Tetilenglicol = 80°C Petilenglicol = 1 Atm	Flujo calculado por bloque "Design Spec" con tolerancia del 0,1% Flujo de solvente a la salida de 60 kmol/h
Suma	2(N ₁ +N ₂)+3C+25	Variables Totales	96 variables

Fuente: Elaboración propia

Nota*: RR se refiere a reflujo molar, D a destilado en base molar, N a número de etapas, x a composición en base molar.

Según lo mostrado en la Tabla 4, si se hace una comparación entre las variables propuestas como parámetros, y restando la suma de los grados de libertad, se obtiene que el sistema tiene cero grados de libertad, por ende, el sistema se puede simular completamente. Así mismo en la figura 6 se muestran los resultados de la simulación, como antes se ha mencionado, los servicios propuestos, son hechos por vapor de caldera y agua de enfriamiento.

Figura 6.Diagrama PFD para la destilación extractiva



	Unidad	AZEO+	EGLICOL	ENTRAIN	ETOH CAR	FEED2	MAKEUP	RECY+	WATER
Fracción de Vapor (ψ)		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Temperatura	C	40,00	195,78	80,00	77,96	141,02	80,00	80,00	99,52
Presión	bar	1,03	1,00	1,01	1,00	1,00	1,01	1,01	1,00
Entalpía Molar	GJ/kmol	-276,98	-430,04	-449,94	-270,70	-407,37	-450,24	-449,91	-321,71
Entropía Molar	GJ/kmol-K	-0,311	-0,376	-0,424	-0,324	-0,344	-0,425	-0,424	-0,214
Densidad Molar	kmol/m ³	18,93	15,32	17,23	16,01	18,69	17,21	17,23	32,54
Densidad Masica	kg/m ³	792,30	949,75	1.068,16	734,44	998,51	1.068,19	1.068,16	972,81
Flujo de Entalpía	GJ/hr	-27,70	-23,70	-27,05	-23,01	-30,60	-2,25	-24,79	-6,43
Flujo molar	kmol/hr	100,00	55,11	60,11	85,00	75,11	5,00	55,11	20,00
Etanol	kmol/hr	85,00	0,00	0,00	84,37	0,63	0,00	0,00	0,63
Agua	kmol/hr	15,00	0,11	0,11	0,62	14,48	0,00	0,11	14,38
Etilenglicol	kmol/hr	0,00	55,00	60,00	0,01	59,99	5,00	55,00	4,99
Mole Fractions									
Etanol		0,85	0,00	0,00	0,99	0,01	0,00	0,00	0,03
Agua		0,15	0,00	0,00	0,01	0,19	0,00	0,00	0,72
Etilenglicol		0,00	1,00	1,00	0,00	0,80	1,00	1,00	0,25
Caudal	m ³ /hr	5,28	3,60	3,49	5,31	4,02	0,29	3,20	0,61
Flujo de disponibilidad	GJ/hr	-18,43	-17,52	-19,44	-14,80	-22,90	-1,62	-17,82	-5,16
Disponibilidad Molar	GJ/kmol	-184,29	-317,98	-323,45	-174,12	-304,93	-323,57	-323,44	-257,81
Flujo Exergetico	GJ/hr	0,01	0,34	0,04	0,05	0,20	0,00	0,04	0,02
Exergia Molar	GJ/kmol	50,27	6.140,37	678,83	605,69	2.674,36	679,40	678,78	853,65

Fuente: Elaboración propia

3. TERMOECÓNOMIA

Como ya se comentó anteriormente, el fundamento principal de la termoeconomía es encontrar el costo exergético de todas las corrientes del sistema mediante modelos económicos para el diseño del proceso. Para realizar un análisis termo económico se puede plantear un algoritmo¹⁰⁰:

- 1) Realizar un análisis Exergético: Donde se calculan irreversibilidades, exergía destruida, eficiencias termodinámicas y disponibilidad en general.
- 2) Realizar un análisis Económico: Donde se plantea un modelo económico para la estimación de costos variables y fijos, así como costos de combustibles y servicios
- 3) Estimación de costos exergéticos: En combinación del análisis exergético y el análisis económico, se pueden estimar los costos de energía útil del sistema, con ella generando un primer análisis sobre variables y condiciones de operación.
- 4) Cálculos termo económicos: Al terminar el paso 3, se pueden concluir mejoras y plantear estrategias para el mejoramiento y el aprovechamiento de la energía en el sistema

Gracias a este análisis se puede determinar que tanto cuesta realmente la energía que se está utilizando en el sistema, aunque el primer paso del algoritmo sea el análisis exergético, es de vital importancia antes dilucidar la gran pregunta que se plantea en la segunda ley. ¿La disponibilidad y la exergía son lo mismo?

3.1 EXERGÍA Y DISPONIBILIDAD

Aunque en términos prácticos, la disponibilidad y la exergía son términos utilizados para remitirse a la energía útil o aprovechable de un sistema¹⁰¹, tienen una gran diferencia y aplicabilidad dependiendo del sistema¹⁰². Por ejemplo, para una torre de destilación, es mejor hablar de disponibilidad más que de exergía, en cambio, para un ciclo de refrigeración, bomba de calor, entre otras máquinas térmicas¹⁰³, es mejor hablar sobre exergía que disponibilidad, esto se debe a la interpretación que generan diversos autores. Aunque al hacer un análisis termo económico en términos

¹⁰⁰SADRI, Somayyeh; KHOSHKHOO, Ramin Haghghi and AMERI, Mohammad. Optimum exergoeconomic modeling of novel hybrid desalination system (MEDAD+RO). 2018. En: ENERGY. Apr 15, vol. 149, p. 74-83

¹⁰¹AHMADI, Pouria y REZAIE, Behnaz. Work Availability and Exergy Analysis. 2008 En: ENTROPY. Aug 10, vol. 20, no. 8, p. 597

¹⁰² Seader Op. Cit. p. 151-153

¹⁰³ MORAN Op cit. pp. 259

de exergía y disponibilidad se puede llegar a la misma conclusión, se pueden obtener análisis diferentes.

La exergía (Ex) es la medida de trabajo útil de un sistema cuando llega al equilibrio, es por esto que la importancia de un estado muerto o ambiental (generalmente de 25°C y 1 atm de presión), es por esto que también las propiedades del estado muerto (entalpía y entropía de estado muerto) son tomados en cuenta, este concepto es mas aplicado a ciclos de refrigeración o calentamiento por qué se debe llegar a un equilibrio térmico con el entorno¹⁰⁴, de la misma manera, la exergía puede ser expresada como lo muestra la ecuación 8.

Ecuación 9. Cuantificación de la exergía para una corriente

$$Ex = (H - H_o) + T_o(S - S_o) \quad \left[\frac{GJ}{h} \right]$$

Fuente: MORAN, Michael J., et al. Fundamentals of Engineering Thermodynamics, 8th Edition. 8th ed. New York: JW Wiley, 2014.

Siendo Ex la exergía, H el flujo de entalpía, S el flujo de entropía y el subíndice o la propiedad en estado muerto, al hacer un balance de exergía partiendo desde la ecuación general de cualquier balance (Entrada – Salida + Generación – Consumo = Acumulación) para un estado transitorio, se puede obtener la ecuación Y.

Ecuación 10. Balance de exergía para un equipo

$$\sum_{i=1}^{\text{calores}} Q_i \left(1 - \frac{T_o}{T_i} \right) + \sum_{i=1}^{\text{entradas}} Ex_i - \sum_{j=1}^{\text{salidas}} Ex_j - Ex_{\text{destruida}} = 0 \quad \left[\frac{GJ}{h} \right]$$

Fuente: MORAN, Michael J., et al. Fundamentals of Engineering Thermodynamics, 8th Edition. 8th ed. New York: JW Wiley, 2014.

Siendo Q la carga térmica, Ex la exergía y $Ex_{\text{destruida}}$ la exergía destruida en el equipo. Donde la exergía destruida significa la cantidad de trabajo que no se está desperdiciando o que falta por usar para llegar al equilibrio térmico, en este caso.

La disponibilidad (A) es la medida de trabajo útil de un sistema en el punto de operación, despreciando el equilibrio y teniendo en cuenta cuanto trabajo del sistema se está perdiendo por mecanismos de transferencia exergéticos¹⁰⁵, es por esto que para una columna de destilación, bomba o intercambiador de calor es más congruente tomar este término, de manera análoga, la disponibilidad para una corriente puede ser expresada como lo muestra la ecuación 10.

¹⁰⁴ MORAN Op cit. p. 259

¹⁰⁵ SEADER Op cit. p. 260

Ecuación 11. Calculo de disponibilidad para una corriente

$$A = H + T_o S \quad \left[\frac{GJ}{h} \right]$$

Fuente: SEADER, Junior D.; HENLEY, Ernest J. and ROPER, Donald K. Separation process principles. 3. ed edit. Hoboken, N.J: Wiley, 2011.

Siendo A la disponibilidad, H el flujo de entalpia, T_o la temperatura del estado muerto y S el flujo de entropía. Para la disponibilidad también se tiene en cuenta el estado muerto, solo que la interacción del sistema con el ambiente es solo tomada en cuenta para la descripción del trabajo útil presente, expresado por la entropía. Al realizar un balance de disponibilidad, se puede llegar a una expresión para calcular el trabajo perdido (LW) o irreversibilidades del sistema de la siguiente manera:

Ecuación 12. Balance de disponibilidad para un equipo

$$\sum_{i=1}^{\text{calores}} Q_i \left(1 - \frac{T_o}{T_i} \right) + \sum_{i=1}^{\text{entradas}} A_i - \sum_{j=1}^{\text{salidas}} A_j - LW = 0 \quad \left[\frac{GJ}{h} \right]$$

Fuente: SEADER, Junior D.; HENLEY, Ernest J. and ROPER, Donald K. Separation process principles. 3. ed edit. Hoboken, N.J: Wiley, 2011.

Siendo Q la carga térmica, A la disponibilidad de una corriente i y LW el trabajo perdido en el equipo. Las eficiencias de segunda ley pueden ser calculadas a partir del trabajo mínimo de separación mostrado por la ecuación 12, y el trabajo perdido del sistema, esto mostrara la cantidad de energía que el sistema aprovecho para la separación¹⁰⁶, o en otras palabras, la cantidad de energía útil de toda la que entra, en cambio el trabajo mínimo es la cantidad de energía requerida para la separación de algunos componentes con composiciones parametrizadas.

Ecuación 13. Trabajo mínimo para una columna de destilación

$$W_{min} = \sum_{i=1}^{\text{entradas}} A_i - \sum_{j=1}^{\text{salidas}} A_j \quad \left[\frac{GJ}{h} \right]$$

Fuente: SEADER, Junior D.; HENLEY, Ernest J. and ROPER, Donald K. Separation process principles. 3. ed edit. Hoboken, N.J: Wiley, 2011.

Ecuación 14. Eficiencia energética de separación para una columna de destilación

$$\eta_{sep} = \frac{W_{min}}{W_{min} + LW} \quad [Adim]$$

Fuente: SEADER, Junior D.; HENLEY, Ernest J. and ROPER, Donald K. Separation process principles. 3. ed edit. Hoboken, N.J: Wiley, 2011.

Siendo W_{min} el trabajo mínimo de separación, A la disponibilidad, LW el trabajo perdido y η_{sep} la eficiencia energética de separación.

¹⁰⁶ SEADER Op. cit. p. 260

Las ecuaciones anteriormente mostradas son válidas solamente para columnas de destilación. En cambio, los balances están estandarizados para cualquier equipo del esquema tecnológico.

3.1.1 Cálculos exergético. Al remplazar las ecuaciones 11 y 12 respectivamente, queda como incógnita el calor de rehervección y de condensación para cada columna, estos son realizadas a través de un balance de energía en torno a la cantidad de líquido condensado en la columna (Véase ecuación 14), los calores de la columna de destilación extractiva y la de recuperación son -5.335, 6.473 GJ/h y -1.542, 2.005 GJ/h respectivamente. Se pueden obtener los resultados mostrados en la Tabla 5 y desglosados en el Anexo B:

Tabla 5. Trabajo perdido para cada uno de los equipos presentes en el esquema tecnológico

	Unidad	EXTR	REC	COOLER	MIXER
Descripción					
Exergía Destruída	GJ/h	1.960	0.708	0.300	2.36E- ₀₅
Trabajo Perdido	GJ/h	1.999	0.640	0.300	2.36E- ₀₅
Trabajo Mínimo	GJ/h	0.168	0.223	N/A	N/A
Eficiencia Termodinámica		7.74%	25.85%	98.32%	99.99%

Fuente: elaboración propia

El que una columna tenga una eficiencia del 7.4% se traduce en un desperdicio energético del 92.6%, a grandes rasgos, el desperdicio de energía es generalmente dado la interacción del entorno hasta llegar al equilibrio. Al realizar este mismo análisis a la columna de destilación de recuperación y demás equipos se puede llegar a los resultados mostrados en la Tabla 5.

Como se puede observar, el desperdicio mayor que se obtiene en la torre de destilación es causado por la torre de recuperación, como ya antes se ha mencionado, esto se debe a un mal diseño, el cual solo está proporcionando la purificación del agente material de separación, en cambio el agua obtenida por cimas tiene cantidades significativas de entrainer, al mejorar el diseño de esta torre se puede minimizar los costos por entrada de *make up*.

Según los criterios de segunda ley, el mezclador puede suponerse como adiabático, la pérdida de exergía es nula, esto se puede ver referenciado con el trabajo perdido y mínimo, no es necesario energía para que la mezcla sea posible. Con esto se completa el análisis exergético y se da paso al análisis económico.

3.2 Análisis económico

Al mencionar un análisis termoeconómico, automáticamente nos remitimos a la idea del acople de un modelo termodinámico con un modelo económico¹⁰⁷, mientras el modelo termodinámico es dictado por las leyes y los mecanismos de transferencia de exergía, el modelo económico debe estar en capacidad de predecir los costos del sistema, tanto los costos de operación (Z^{op}) dados, por los costos variables (C_v) siendo las cargas energéticas y de bombeo, como a su vez los costos fijos (C_f); Y los costos de mantenimiento (Z^{man}) por limpieza, paro de operación, entre otros, al ser un diseño conceptual¹⁰⁸, los costos de mantenimiento se pueden desprestigiar, haciendo que los costos de la torre sean solo función de los costos de operación por construcción y por costeo energético¹⁰⁹.

3.2.1 Modelo económico. El correcto modelamiento y ejecución de un modelo económico es dependiendo del sistema el cual se esté analizando¹¹⁰, en la literatura se pueden encontrar gran cantidad de modelos para la predicción de costos de equipos y energéticos, en la tabla 7, se muestran los modelos más utilizados a nivel de literatura. No todos los modelos necesitan las mismas variables para la predicción de los costes. La decisión que aquí compete es la inclusión de un modelo el cual haya generado la mayor exactitud posible para esquemas de destilación, a este problema el modelo que cumple con lo anterior acotado es el de Luyben, el cual es una aproximación de las correlaciones de Marshal & Swift con promedios históricos anuales.

Cuadro 6. Revisión literaria sobre algunos modelos económicos útiles para destilación.

Modelo	Año*	Equipos disponibles	Variables a conocer**	Autor
Correlaciones para torres de destilación	2018	Columnas de destilación, Intercambiadores de calor	D (m) H (m) Ai (m ²)	Luyben ¹¹¹

¹⁰⁷ VALERO, Antonio. Termoeconomía: El punto de encuentro de la Termodinámica, la Economía y la Ecología. 1998 En: BOLETÍN CF+S. May 20, vol. 1, no. 5. p. 1-5

¹⁰⁸ SILVA Op cit. p. 11

¹⁰⁹ DEMIREL, Yasar. Nonequilibrium thermodynamics. 2002 3. ed. ed. Amsterdam [u.a.]: Elsevier, 2014. ISBN 0444595570

¹¹⁰ BOEHM, Barry W. Software engineering economics. 7.print. ed. Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1981. ISBN 0138221227

¹¹¹ FIEG, G. Distillation Design and Control Using Aspen Simulation. 2018 Von W. L. Luyben.

Cuadro 6. Continuación

Modelo	Año*	Equipos disponibles	Variables a conocer**	Autor
Método de Marshal & Swift	1988	Columnas de destilación, reactores, tanques almacenamiento, intercambiadores de calor	V (m ³) A (m ²) L (m) M&S (adim)	Douglas ¹¹²
CAPCOST	2012	Columnas de destilación, reactores, tanques almacenamiento, intercambiadores de calor	V (m ³) A (m ²) L (m)	Turton ¹¹³

*Última actualización propuesta para el modelo

** Para satisfacer el esquema tecnológico actual siendo D el diámetro en metros, A el área de intercambio térmico, L la longitud de la columna en m, V liquido de la columna en m³ y M&S el índice de corrección de Marshal & Swift.

Fuente: Elaboración propia

Aunque el modelo de marshal & Swift (M&S) sea un modelo que presenta grados altos de exactitud en la predicción, tiene una limitante por su coeficiente de amortización anual, el cual debe ser consultado y solo puede ser encontrado hasta 2012¹¹⁴, el método capcost necesita el uso de un software especializado debido a que este funciona con la aproximación de polinomios de costos. Se determina que el método propuesto por Luyben es utilizado para el presente proyecto, debido a que el que es simplificado y deducido a partir del modelo de M&S con un coeficiente de amortización constate.

Como se ha venido tratando, el modelo de Luyben, es un paquete de ecuaciones las cuales son dependientes del diámetro de la torre, del número de platos, de la altura de la torre, del área de intercambio calórico del rehervidor y del condensador; En otras palabras, del dimensionamiento global de la torre, estos costos son amortizados a un periodo de 3 años generalmente (tiempo general de fabricación y puesta en marcha) generando un costo por unidad de tiempo, que junto a la suma de los costos por servicios de calor y condensación genera una función de costo total anualizado (TAC) que se transformara posteriormente en la variable (Z).

Asi mismo, al observar el esquema se puede ver que la bomba puede ser un elemento que no genere tanta importancia debido a su cambio de presión que puede

¹¹² DOUGLAS, James M. Conceptual design of chemical processes. Boston [u.a.]: McGraw-Hill, 1988. ISBN 9780070177628

¹¹³ TURTON, Richard. Analysis, synthesis, and design of chemical processes. 2012 3. rev. ed. ed. Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall, 2012.

¹¹⁴ TURTON Op cit. p. 180

ser despreciada ($\Delta P = 0.1325$ bar), debido a esto el esquema sera simplificado a dos torres de destilación, un intercambiador de calor y un mezclador adiabático.

3.2.2 Dimensionamiento de torres de destilación

Una consecuencia directa de emplear un análisis económico a un esquema tecnológico, es el dimensionamiento directo para todos los equipos del sistema. El cálculo de diámetros y alturas de las torres de destilación o la estimación de áreas de intercambio térmico para todos los intercambiadores de calor del sistema. Esta es una de las partes más importantes, debido a que cualquier modelo económico existente utiliza las variables de diseño para ello.

- Diámetro de torre de destilación

Según la literatura, una torre de destilación de N platos, posee N diámetros; Donde el diámetro que se utiliza para la construcción y dimensionamiento de la torre es el máximo de los anteriores calculados. Esto teniendo en cuenta los niveles de agua y seguridad para evitar exceso de líquido (lloriqueo) o vapor (explosión inmediata). Para efectos prácticos estos serán calculados con el simulador bajo el módulo *radfrac Columns Internals*®, dentro de este módulo, el cálculo de diámetro es suministrado bajo la suposición de un tipo de plato y un tipo de empaque proporcionado por una base de proveedores dentro del mismo simulador, los resultados obtenidos para las torres de destilación son los siguientes:

Tabla 6. Resultados del cálculo de diámetro de las columnas de destilación

Torre	Tipo de interno	Tipo de plato	Espaciamento (m)	Diámetro (m)
EXTR	Tamiz	SIEVE	0.6096	0.8446
REC	Tamiz	SIEVE	0.6096	0.4919

Fuente: Elaboración propia

El espaciamento es un valor que predeterminadamente se obtiene por referentes literarios, según la literatura, este es el valor común para cualquier torre de destilación¹¹⁵. La torre de destilación extractiva es la más grande del sistema, esto se debe a que su reflujo es el mayor entre las dos torres, debido que a mayor reflujo un mayor diámetro de la torre de destilación.

- Altura de la torre

¹¹⁵ AN, Yi, et al. Design/optimization of energy-saving extractive distillation process by combining preconcentration column and extractive distillation column. En: CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE. 2016 Oct 2, vol. 135, p. 166-178

La altura de una torre de destilación es proporcional a la cantidad de etapas teóricas de la misma, suponiendo que la primera y última etapa corresponden al condensador y rehervidor respectivamente¹¹⁶, es por tal motivo, que la altura mínima puede ser definida como:

Ecuación 15. Longitud mínima para una columna de destilación

$$L_{min} = \xi(N_{teóricas} - 2) \quad [m]$$

Fuente: FIEG, G. Distillation Design and Control Using Aspen Simulation. Von W. L. Luyben. En: CHEMIE INGENIEUR TECHNIK. 2016 mar. vol. 87, no. 3, p. 312

Donde ξ hace referencia al espaciamiento entre plato-plato y $N_{teóricas}$ al número de etapas teóricas de la columna, aplicando la heurística planteada por Douglas¹¹⁷, la altura real de la torre será 20% extra a la altura mínima, siendo esta:

Ecuación 16 Longitud real para una columna de destilación

$$L = 1.2L_{min} = 1.2 * \xi(N_{teóricas} - 2) \quad [m]$$

Fuente: FIEG, G. Distillation Design and Control Using Aspen Simulation. Von W. L. Luyben. En: CHEMIE INGENIEUR TECHNIK. Mar. vol. 87, no. 3, p. 312

Al remplazar la ecuación 13, se puede obtener el dimensionamiento completo para las dos columnas de destilación, esta información es mostrada en la Tabla 7, El desarrollo matemático puede ser consultado en el Anexo C del presente documento.

- Áreas de intercambio térmico

Lo más importante de una torre de destilación, son las cargas térmicas suministradas por la condensación y rehervición, estas permiten el gradiente de temperatura necesario para la generación del equilibrio de fases y con ello permitiendo la separación de un componente. Los condensadores y rehervidores no son mas que intercambiadores de calor, los cuales pueden ser modelados con la ecuación de diseño mostrada en la ecuación 14, Donde A es el área de intercambio o en otras palabras, la cantidad de espacio que ocupa, U el coeficiente de transferencia global de calor, y LTDM la media logarítmica de temperatura entre el fluido de proceso y el fluido de servicio¹¹⁸.

¹¹⁶ FIEG Op cit.pp. 70

¹¹⁷ DOUGLAS Op cit. p. 430

¹¹⁸ FIEG Op. Cit. p. 156

Ecuación 17. Ecuación de diseño de un intercambiador de calor

$$A = \frac{Q}{U LTDM} \quad [m^2]$$

Fuente: FIEG, G. Distillation Design and Control Using Aspen Simulation. Von W. L. Luyben. En: CHEMIE INGENIEUR TECHNIK. Mar. vol. 87, no. 3, p. 312

Siendo A el área de intercambio térmico en m², Q la carga térmica necesaria para dicho intercambiador calculada por medio de un balance de energía en KW, U el coeficiente global de transferencia de calor en KW/m²-K y LTDM la media logarítmica de temperatura en K. El calor es calculado por medio de simulación, el coeficiente global de transferencia es estimado por el simulador para condiciones de vapor de media presión y agua de enfriamiento para cada caso. Los resultados obtenidos para el sistema completo de destilación son mostrados en la Tabla 7. De manera análoga a los diámetros, el comportamiento que se puede observar es la disminución de área de intercambio, diámetro y altura de la torre para este sistema, esto se traduce en que los costos de operación y construcción más altos los tendrá la columna de destilación extractiva

Tabla 7. Dimensionamiento total para el esquema tecnológico

Equipo	Diámetro (m)	Altura (m)	Área rehervidor (m ²)	Área condensación (m ²)
EXTR	0.846	16.1	90.942	125.162
REC	0.492	3.66	28.18	36.17
COOLER	-	-	-	212.60

Fuente: Elaboración propia

- Costo Total Anualizado (TAC)

El costo total anualizado es una manera de cuantificar los costos para un esquema de destilación con integración térmica propuesta por Luyben¹¹⁹, esta es una función financiera la cual tiene en torno dos términos, uno por costos de construcción (CC), conocidos también como capitales o fijos, y un término de costos energéticos (CE) o energéticos del sistema. Esta función tiene la ventaja de poder amortizar dichos costos a un término fijo de tiempo y con esto generar diferentes comparaciones para los sistemas¹²⁰. Estos son dados por la ecuación 15, donde posteriormente serán desglosados los términos anteriormente mencionados:

Ecuación 18. Calculo del Costo total anualizado (TAC)

$$TAC = \frac{CC}{Amortización} + CE \quad \left[\frac{U\$}{año} \right]$$

Fuente: FIEG, G. Distillation Design and Control Using Aspen Simulation. Von W. L. Luyben. En: CHEMIE INGENIEUR TECHNIK. Mar. vol. 87, no. 3, p. 312

¹¹⁹ FIEG Op cit p. 81

¹²⁰ BRITO Op cit. p. 15

Siendo CC los costos capitales en U\$, CE los costos energéticos en U\$/año y la amortización un periodo de tiempo donde se financie un equipo en años.

Los **costos capitales**, son función de la dimensión de los equipos, estos son distribuidos por costos de cilindro y etapas para la torre de destilación (CT) y el costo de intercambio térmico (CA), como se ha venido mencionando, los costos de tubos y etapas son proporcionales al diámetro y la altura de la columna¹²¹, este costo puede ser calculado por la ecuación 16.

Ecuación 19. Calculo del costo capital para el cilindro y las etapas en una columna de destilación

$$CT = 17,640 D^{1.066} L^{0.802} \quad D \text{ y } L \text{ en } m \quad [U\$]$$

Fuente: FIEG, G. Distillation Design and Control Using Aspen Simulation. Von W. L. Luyben. En: CHEMIE INGENIEUR TECHNIK. Mar. vol. 87, no. 3, p. 312

Así mismo, para los costos de intercambio térmico (CA) los costos puede ser calculados mediante la ecuación 17, donde depende netamente de la área de intercambio térmico.

Ecuación 20. Calculo de costos capitales para un intercambiador de calor

$$CA = 7,296 A^{0.65} \quad A \text{ en } m^2 \quad [m]$$

Fuente: FIEG, G. Distillation Design and Control Using Aspen Simulation. Von W. L. Luyben. En: CHEMIE INGENIEUR TECHNIK. Mar. vol. 87, no. 3, p. 312

Los **costos energéticos**, son calculados a través del producto del precio unitario de cargas térmicas y el calor necesario para las cargas térmicas¹²², estas son tomadas de la literatura y mostradas en la Tabla 8, hay que tener en cuenta que el servicio empleado no debe generar cruces de temperatura, haciendo que la operación sea termodinámicamente imposible.

¹²¹ ZHU,Zhaoyou, et al. Separation of acetonitrile/methanol/benzene ternary azeotrope via triple column pressure-swing distillation. 2016 En: SEPARATION AND PURIFICATION TECHNOLOGY. Sep 1, vol. 169, p. 66-77

¹²² FIEG Op cit. p. 82

Tabla 8. Servicios térmicos comúnmente utilizados para torres de destilación

Servicio Utilizado		Costo C_i (\$/GJ)
Servicios de calentamiento		
Vapor Baja Presión (6 bar, 160°C)	LP	7,78
Vapor Media Presión (11 bar, 184°C)	MP	8,22
Vapor Alta Presión (42 bar, 254°C)	HP	9,88
Electricidad	EP	16,8
Servicios de refrigeración		
Agua de enfriamiento (5°C a 15°C)	CW	4,43
Refrigerante a -20°C	R1	7,89

Fuente: FIEG, C. Distillation design and control using Aspen Simulación. 2018, p. 84

Los resultados obtenidos son mostrados en la Tabla 9, donde se toma una amortización de 3 años.

Tabla 9. Calculo de costos totales anualizados para el esquema tecnologico

Equipo	CT (\$/año)	CA_{Cond} (\$/año)	CA_{Reh} (\$/año)	CE (\$/año)
EXTR	45,705.3	56,146.3	45,650.6	134,738
REC	7,821.8	25,055.9	21,300.9	46.814.4
COOLER	-	237,683	-	2.03
			TAC (k\$/año)	492.142

Fuente: Elaboración propia

3.3 ESTIMACIÓN DE COSTOS EXERGETICOS

La idea de la búsqueda del costo de energía que aporta cada corriente es abstracta, a principios del siglo XX fue la fuerza impulsora al desarrollo de la teoría termoeconómica. Al incluir la sinergia entre la termodinámica y la economía, se puede encontrar una relación proporcional entre el costo de la energía útil del sistema y la disponibilidad de la corriente¹²³. Esta relación es cuantificada con el flujo total de la corriente, la disponibilidad de la corriente (o energía útil) y el costo unitario exergetico de la corriente como se muestre a continuación:

¹²³ MODESTO, Marcelo; ZEMP, Roger J. and NEBRA, Sílvia A. Ethanol Production from Sugar Cane: Assessing the Possibilities of Improving Energy Efficiency through Exergetic Cost Analysis. 2009 En: HEAT TRANSFER ENGINEERING. Mar 1, vol. 30, no. 4, p. 272-281

Ecuación 21. Costo exergetico para una corriente i

$$C_i = A_i F_i c_i \quad \left[\frac{U\$}{h} \right]$$

Fuente: MODESTO, M., ZEMP, R., NEBRA, S. Ethanol production from sugar cane: comparision of juice cane extraction systems-mill and diffuser through exergetic cost analysis. En: ECOS. 2006., p. 739 - 74

Siendo F el flujo total de la corriente en kmol/h, A la disponibilidad de la corriente en GJ/kmol y c el costo unitario de energía útil de la corriente que para este caso se trabajara en U\$/GJ y C el costo exergetico neto en U\$/h. La interpretación del costo anterior mencionado es relacionada con la cantidad de energía térmica que puede tener una corriente, por ello a mayor temperatura un costo exergetico unitario mayor.

Estos costos en principio deben determinarse junto a un sistema de ecuaciones con los balances de insumos, el cual es el principal objetivo termoeconómico.

3.3.1 Análisis R/P/I La manera apropiada de presentar y aplicar el análisis termoeconómico para cualquier sistema termodinámico¹²⁴, es clasificar cada una de las corrientes en tres clases, Los recursos (R), siendo el gasto material para la obtención de un producto (P), el cual es el interés de realizar la operación como tal; Asi como en un proceso existen corrientes P que son de interés, también se generan corrientes por merma o desperdicio (I) las cuales no tienen interés en general para el diseño. Cualquiera de estas corrientes puede ser de carácter material o de carácter energético, siendo asi para una torre de destilación las corrientes de alimento, solvente y cargas térmicas de condensación y rehervición corrientes R, mientras que el compuesto que se purifica es una corriente P, mientras que la perdida de calor por irreversibilidades termodinámicas o por el material de construcción se puede representar como corrientes I¹²⁵.

El objeto de clasificar cada una de las corrientes es presentar y generar suposiciones para las corrientes de residuos y obtener asi los valores de las corrientes de recursos y productos, estas pueden ser halladas al realizar un balance de costos exergeticos tomando como volumen de control un equipo k ¹²⁶.

¹²⁴ MONTES, J. M., GARCÍA, J. G., QUEROL, E. Termoeconomía y optimización energética. 2009. España: Ediciones Peninsular.

¹²⁵ NITHYANANDAM, K. and PITCHUMANI, R. Cost and performance analysis of concentrating solar power systems with integrated latent thermal energy storage. 2014 En: ENERGY. Jan 1, .vol. 64, p. 793-810

¹²⁶ MODESTO Op cit. p. 7

Ecuación 22. Balance de costos exergéticos para cada equipo del sistema

$$\sum_{\text{entrada}} c_i A_i - \sum_{\text{sale}} c_i A_i + \sum_{\text{energia}} c_i \psi_j = 0 \quad \left[\frac{U\$}{h} \right]$$

Fuente: MODESTO, M., ZEMP, R., NEBRA, S. Ethanol production from sugar cane: comparison of juice cane extraction systems-mill and diffuser through exergetic cost analysis. En: ECOS. 2006., p. 739 - 74

Donde ψ representa la carga energética que se suministra al sistema, ya sea por energía eléctrica, vapor de caldera, agua de enfriamiento, refrigerante, entre otras. Estas ecuaciones son resueltas en conjunto y así obteniendo los costos de la energía útil para cada corriente.

Como primera medida se deben hacer varias suposiciones para la correcta convergencia del sistema de ecuaciones lineales. Según Lozano y Valero¹²⁷, el costo unitario para las corrientes de entrada en un balance global toma el valor de 1, esto debido a que son corrientes R y con ello son indispensables para que la operación sea hecha. Para este caso, la corriente de materia prima para el sistema termoeconómico son el alimento de entrainer fresco (MKUP) y el alimento Azeotrópico (AZE0+). Las corrientes de residuo I tendrán un valor de 0, para el esquema se tomará el agua residual de la cima de la torre de recuperación dado que la corriente tiene impurezas de etanol y etilenglicol. Y las corrientes de producto P deben ser proporcionales a la magnitud de disponibilidad que se obtenga en el sistema.

Los costos estimados para el esquema tecnológico pueden ser consultados en la Tabla 14 y 15 del Anexo D y E respectivamente, donde se muestran cada uno de los flujos de disponibilidad para las corrientes presentes en el sistema.

3.4 CALCULOS TERMOECONOMICOS

Los balances termoeconómicos son una herramienta útil cuando se trata de encontrar los costos de las irreversibilidades¹²⁸, estos no deben confundirse con los cálculos exergéticos del anterior paso, los anteriores costos hacen referencia a la capacidad de energía útil del sistema, mientras que los costos termoeconómicos (π) están relacionados con la distribución y el aporte de estos con los costos de operación y construcción para el esquema¹²⁹. La relación de los costos termoeconómicos con los costos de operación y construcción (Z) son planteados

¹²⁷ LOZANO, M. A. and VALERO, A. Theory of the exergetic cost. 1993 En: ENERGY. vol. 18, no. 9, p. 939-960

¹²⁸ FERNANDEZ RAMIREZ, Juan Sebastian. Análisis termoeconómico de un proceso de producción de biodiesel que opera de manera convencional y por destilación reactiva. Fundación Universidad de America, 2018.

¹²⁹ SILVA Op cit. p. 78

por un balance de insumos mostrado por la ecuación 6. Como ejemplo se planteará la ecuación para la torre de destilación con doble alimentación, torre EXTR.

Ecuación 23. Balance de insumos para la columna de destilación extractiva

$$(\pi)_{ENTRIAN} + (\pi)_{AZEO+} + Z_{EXTR}^{OP} = (\pi)_{ETOHCAR} + (\pi)_{FEED2} \quad \left[\frac{U\$}{h} \right]$$

Fuente: MONTES, J. M., GARCÍA, J. G., QUEROL, E. Termoeconomía y optimización energética. 2009. España: Ediciones Peninsular.

De forma análoga se deben plantear las ecuaciones pertinentes para la torre de recuperación, el intercambiador de calor y el mezclador. Al generar estas ecuaciones se deben solucionar resolviéndolas en base a los costos termoeconómicos. Los costos termoeconómicos deben ser calculados como criterio de convergencia que el costo de reciclo y el de make up sean similares, según las recomendaciones propuestas por Silva¹³⁰. Estas ecuaciones y su desarrollo pueden ser consultadas en el Anexo E.

Cabe aclarar que tanto el paquete de ecuaciones propuestas en la ecuación 16 y el paquete de ecuaciones de la ecuación 3 deben ser solucionados de manera simultánea, así generando un sistema de ecuaciones robusto., la relación sinérgica entre el costo termoeconómico y el costo exergetico puede ser expresado como la división de los costos por el flujo de producto obtenido¹³¹. En la Tabla 10, se pueden observar los costos exergeticos y termoeconómicos obtenidos para cada uno de las corrientes mostradas en la Figura 5.

Tabla 10. Resultados obtenidos para los costos exergeticos (c_i) y termoeconómicos (π_i)

Corriente	C_i (U\$/GJ)	π_i (U\$/s)
MAKEUP	1,00	0,13
RECY+	4,51	0,42
ENTRAIN	4,13	0,40
AZEO+	1,00	0,14
ETOHCAR	10,86	0,13
FEED2	3,51	0,36
EGLICOL	4,58	0,43
WATER	0,00	0,11

Fuente: Elaboración propia

Como se puede observar, los costos termoeconómicos siempre serán menores a los costos exergeticos respectivamente, esto para las corrientes R y las corrientes

¹³⁰ SILVA Op cit. p. 68

¹³¹ FERNANDEZ Op cit. p. 62

P, esto es debido a que en los primeros costos no se están teniendo en cuenta estos costos de operación, y que, aunque el costo real de la energía útil sea hallado, solo un porcentaje diminuto estará aportando a la sostenibilidad del equipo, el restante debe ser suministrado en otras formas de ingresos monetarios¹³².

3.4.1 Valor termoeconómico por pérdidas exergéticas En el posterior capítulo se planteará una mejora del esquema tecnológico a partir de la optimización del proceso, es por esto que se debe buscar un parámetro el cual se pueda fijar como un análisis post-optimización como punto de comparación¹³³. Para esto se plantea el valor termoeconómico por pérdidas exergéticas, no es más que un parámetro el cual cuantifica pérdidas monetarias por irreversibilidades termodinámicas. En otras palabras, es el costo el cual es perdido de cada una de las corrientes exergéticas por el trabajo perdido, en principio, al momento de aplicar la optimización, el principal objetivo es hacer que este costo tienda a lo menor posible bajo una función indirecta de minimización de calor, la cual es dependiente de la entropía generada, y por ende, de la exergía destruida del sistema¹³⁴.

Este valor no puede ser del todo cero, sería una inconsistencia real a los modelos termodinámicos, esto significaría que dicho proceso está en equilibrio global térmico, mecánico y material¹³⁵, o en otras palabras que no existiría transferencia de calor, momento y masa; Sería un sistema a condiciones muertas o ambientales. Algunos autores de la literatura utilizan este parámetro como opción para la determinación de mejoras del sistema, y no es más que un balance global donde se evalúa el trabajo perdido global con el producto de un balance en términos de costos exergéticos¹³⁶. La anterior idea puede ser expresada en forma de ecuación de la siguiente manera:

Ecuación 24. Valor termoeconómico de las pérdidas de exergía

$$\pi_d^* = \sum_j LW_j * \left(\sum_{\text{entradas}} c_i - \sum_{\text{salidas}} c_i \right) \left[\frac{U\$}{h} \right]$$

Fuente: SZARGUT, Jan. Exergy method technical and ecological applications. 1st ed. WIT Press, 2005

Siendo LW el trabajo perdido de cada equipo, y c el costo exergetico de las corrientes de entrada y salida respectivamente. Este servirá como un parámetro termoeconómico como una decisión para concluir si existe una mejora en el esquema.

¹³² CARAPPELLUCCI, Roberto y GIORDANO, Lorena. A comparison between exergetic and economic criteria for optimizing the heat recovery steam generators of gas-steam power plants. 2013 En: ENERGY. Sep 1., vol. 58, p. 458-472

¹³³ AMROLLAHI, Zeinab; ERTESVÅG, Ivar S. and BOLLAND, Olav. Optimized process configurations of post-combustion CO2 capture for natural-gas-fired power plant—Exergy analysis. 2011 En: INTERNATIONAL JOURNAL OF GREENHOUSE GAS CONTROL. Nov. vol. 5, no. 6, p. 1393-1405

¹³⁴ Ibid pp. 1401

¹³⁵ DEMIREL Op cit p. 350

¹³⁶ SZARGUT, Jan. Exergy method technical and ecological applications. 1st ed. WIT Press, 2005

4. MODIFICACIONES DEL ESQUEMA TECNOLÓGICO

El análisis de sensibilidad para un sistema es ampliamente utilizado al momento de tener una simulación o un esquema tecnológico¹³⁷. Eso es realizado mediante la identificación de una o más variables independientes que se deseen maximizar o minimizar, a su vez, se deben identificar las variables dependientes a la anterior mencionada¹³⁸. Esto es una metodología utilizada por innumerables autores para mejorar el proceso sin tener la necesidad de utilizar algún método de optimización, pero con la desventaja de que pueden encontrar una variable en su estado mínimo/máximo local mas no el global. Según la teoría de la optimización, una función puede tener un numero infinito de puntos máximos y mínimos, pero solo tendrá un punto máximo o mínimo cuando el sistema este restringido¹³⁹.

4.1 TEORIA GENERAL DE LA OPTIMIZACIÓN

Todo problema de optimización cuenta con tres partes importantes, una función objetivo (FO), una naturaleza matemática la cual estará enfocada a minimizar o maximizar, por último, las restricciones del problema de optimización. Generalmente, la función objetivo debe tener relación con las variables independientes más que con las dependientes¹⁴⁰. La razón de esto recae en la definición global de las mismas, las variables dependientes deben tener cambios al alterar una o más variables independientes. Para el caso de un diseño de un equipo, pueden acotarse a las variables independientes como las variables de entrada a un sistema (Reflujo, flujo de una corriente, temperatura, entre otras) y las variables dependientes como las de salida (Calor, composición de salida, diámetro, altura).

De manera lúdica, se tomará por ahora una función de una única variable para explicar la definición de máximos y mínimos globales. Sea f una función dependiente de una única variable x , los valores máximos o mínimos pueden ser hallados mediante el criterio de la primera derivada como lo muestra la ecuación 17. Al solucionar esta ecuación por medio de la variable dependiente (x), se obtendrán los valores de los puntos máximos y mínimos del sistema:

Ecuación 25. Definición matemática de punto singular

$$f'(x) = 0$$

Fuente: TAHA, Hamdy. Investigación De Operaciones. 7ma ed. Pearson Educación de México, S.A. de C.V, 2011.

¹³⁷ CANTOR Op cit. p. 60

¹³⁸ TAHA Op cit. p. 150

¹³⁹ NOCEDAL Op cit. p. 321

¹⁴⁰ YANG, Xiao-Ling and WARD, Jeffrey D. Extractive Distillation Optimization Using Simulated Annealing and a Process Simulation Automation. 2018 Server. En: INDUSTRIAL & ENGINEERING CHEMISTRY RESEARCH. Aug 15,.vol. 57, no. 32, p. 11050-11060

Al hallar estos valores, se obtienen los puntos singulares para la función, un punto singular, es aquella pendiente de su recta tangente es 0, por esa razón pueden catalogarse como puntos máximos, mínimos o singulares representados como x_0 ¹⁴¹. Lo que dará este resultado es el criterio de la derivada superior. Se tendrá que derivar nuevamente y hallar el valor para la derivada evaluada en el punto singular, si este valor es positivo el punto se trata como un mínimo, si es negativo como un punto máximo, y si es cero, se debe acudir al criterio de la derivada de orden superior mostrada en la ecuación 18:

Ecuación 26. Criterio de derivada de orden superior

$$f^{(n)}(x_0) \neq 0$$

Fuente: TAHA, Hamdy. Investigación De Operaciones. 7ma ed. Pearson Educación de México, S.A. de C.V, 2011.

El teorema de la derivada superior tiene como premisa hallar el valor de la concavidad de una función por medio de derivadas de orden superior hasta que su valor sea diferente a cero¹⁴². Cuando se halle este valor puede ser tratado como el criterio de la segunda derivada. A continuación, en la tabla 11 es mostrado un resumen de este teorema:

Tabla 11. Tabla resumen para el teorema de derivada de orden superior

Función	< 0	= 0	> 0
f'(x)	Valores sin importancia	Punto máximo, mínimo o singular	Valores sin importancia
f'(x₀)	Punto Máximo	Calcular criterio de derivada superior	Punto Mínimo
f⁽ⁿ⁾(x₀)	Punto Máximo	Punto singular	Punto Mínimo

Fuente: TAHA, Hamdy. Investigación De Operaciones. 7ma ed. Pearson Educación de México, S.A. de C.V, 2011.

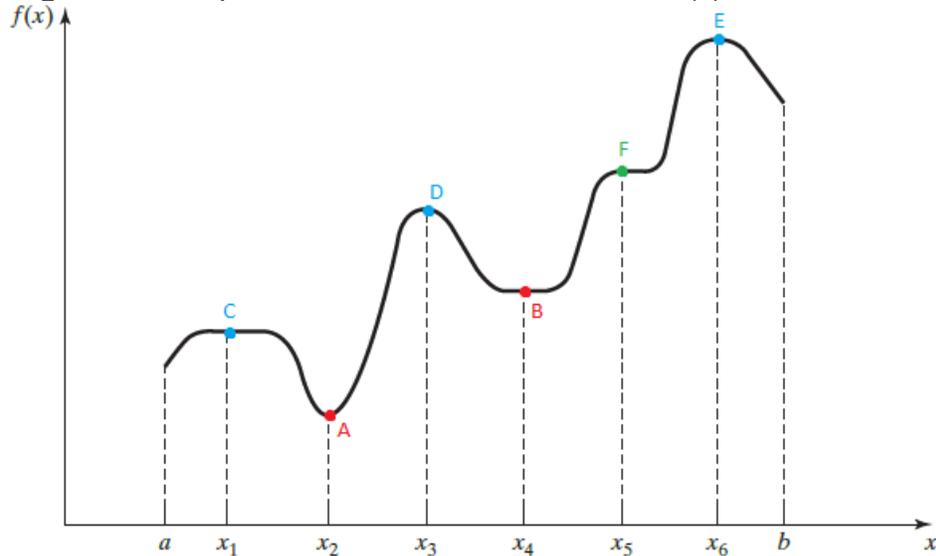
Nótese que la premisa de que la derivada superior deba ser diferente de cero puede no puede cumplirse siempre, esto es característico de funciones logarítmicas o combinadas, es por esto que puede que dicho punto pueda ser un punto singular el cual se debe ignorar. Supongamos que la función f tiene el comportamiento mostrado en la Figura 7. Podemos obtener bajo el análisis anterior que Los puntos A y B corresponden a puntos mínimos, mientras que los puntos C, D y E, corresponden a puntos máximos, y por último, el punto F corresponde a un punto de silla, donde no tiene ningún comportamiento como máximo o mínimo. Como se

¹⁴¹ HURLBERT, Glenn H. Linear optimization. New York: Springer, 2010. ISBN 0387791485

¹⁴² DENTONI, Marta, et al. A simulation/optimization study to assess seawater intrusion management strategies for the Gaza Strip coastal aquifer (Palestine). 2015 En: HYDROGEOLOGY JOURNAL. Mar.vol. 23, no. 2, p. 249-264

puede ver, gráficamente es fácil identificar estos puntos, pero la metodología anteriormente nombrada es de gran utilidad si el grafico es complejo o tiene funciones trigonométricas o logarítmicas.

Figura 7. Comportamiento de la función lúdica $f(x)$



Fuente: Elaboración propia.

4.2 OPTIMIZACIÓN MULTIVARIABLE

La anterior manera de ver un problema de optimización es mas una manera ideal que real, generalmente los modelamientos que aplicamos a los equipos son funciones multivariantes¹⁴³, en otras palabras, son funciones f dependientes de x, y, z, \dots . Entre otras, a la misma vez. Esto hace que cambien los algoritmos presentados y se encuentren nuevos métodos que requieren matemática vectorial. Algunos de estos métodos implican el cálculo de matrices Hessianas acotadas¹⁴⁴, que no son más que derivaciones elementales a partir del método de los multiplicadores de Lagrange:

Ecuación 27. Ecuación base de los multiplicadores de Lagrange

$$L(x_i, \sigma_i, \mu_i) = K(x_i) + \sum_{\text{restricciones}} \sigma_i \mu_i \quad [Adim]$$

Fuente: NOCEDAL, Jorge and WRIGHT, Stephen J. Numerical optimization. New York. 2001

¹⁴³ PROCHAZKA, Hynek. Multivariable robust digital controller design by convex optimization. [0]:HAL CCSD, 2004.

¹⁴⁴ PROCHAZKA Ibid p.25

Siendo K la función objetivo dependiente de las variables x_i , si los coeficientes de sensibilidad para el modelo de los multiplicadores de Lagrange y m_i la restricción i del problema de optimización, este modelo es el base para la solución de los modelos clásicos de aproximación vectorial de optimización. De aquí nace la definición de la Hessiana la cual es mostrada por la ecuación 20:

Ecuación 28. Matriz hessiana acotada

$$H = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_3} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_3} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_3 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_3 \partial x_2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_3^2} \end{bmatrix}$$

Fuente: NOCEDAL, Jorge and WRIGHT, Stephen J. Numerical optimization. New York. 2001

La ecuación 28 esta formulada para un problema de 3 variables, aunque si se tratara de una función con N variables, se generaría una hessiana de N filas y N columnas (NxN). Al calcular el determinante se puede aplicar la teoría anterior para puntos máximos y mínimos.

4.2.1 Optimización en ASPEN PLUS® Una de las partes más importantes de la simulación, es lograr optimizar el proceso desde las bases matemáticas y algorítmicas del proceso¹⁴⁵, para la versión 9.0, el simulador cuenta con diferentes métodos de optimización e, como lo muestra la tabla 12, el simulador cuenta solo con 3 algoritmos de optimización, la Programación Cuadrática Secuencial (SQP), el algoritmo de Optimización de limites por aproximación cuadrática (BOBYQA) y el algoritmo (COMPLEX):

Cuadro 7. Modelos de optimización disponibles en el simulador ASPEN PLUS® en su versión 9.0

Algoritmo	Funcionamiento
SQP ¹⁴⁶	Es un modelo derivado a los multiplicadores de Lagrange con las condiciones de Karush Khun Tucker (KKT). Las cuales aproximan el problema de forma cuadrática generando un máximo o un mínimo según el problema.

¹⁴⁵ CASTAÑEDA J. D., "Optimización de una torre de destilación reactiva para la producción de etilenglicol con base a una función objetivo de carácter térmico". 2019 En: Revista de semilleros universidad de america.

¹⁴⁶ BIEGLER, L.T. and J.E. Cuthrell, "Improved Infeasible Path Optimization for Sequential Modular Simulators, Part II: The Optimization Algorithm," Computers & Chemical Engineering 9, 3, p. 257 (1985)

Cuadro 7. Continuación

Algoritmo	Funcionamiento
BOBYQA ¹⁴⁷	Es un modelo que resuelve la optimización sin usar derivadas, lo hace por el método de <i>regiones de confianza</i> de los cuales genera interpolaciones con aproximaciones cuadráticas, generando un comportamiento paraboloides y por ende un mínimo o máximo.
COMPLEX ¹⁴⁸	Es un método meta heurístico propuesto en el año 1965, el cual no tiene la necesidad de cálculo de derivadas, su funcionamiento se basa en limitar dos extremos de la función y a partir de múltiples iteraciones buscar el máximo/mínimo. Con un criterio de derivada de orden superior saber su naturaleza matemática.

Fuente: Elaboración propia

Es un hecho que el método más riguroso es el SQP, debido a su complejidad y fundamento matemático anteriormente explicado, en cambio el BOBYQA puede ser utilizado para sistemas más simples con ciclos controlados y no más de 3 equipos¹⁴⁹, en cambio el método simplex es utilizado más para esquemas más simples que no requieran un nivel de convergencia muy estricto, para casos como mezcladores o divisores como tal¹⁵⁰.

Por tal motivo, para este caso se empleará una función objetivo encontrada para un caso de estudio de destilación extractiva bajo el modelo SQP con su respectivo análisis post-optimización.

4.3 METODOLOGIA DE OPTIMIZACIÓN

Optimizar un proceso no es del todo fácil, siempre se debe escoger una metodología adecuada para su correcta convergencia, un ejemplo de la anterior afirmación son los puntos iniciales de corrida de optimización, al momento de realizar una optimización no se debe olvidar que es un método numérico en si y que se deben tener estimaciones iniciales buenas para que converja rápidamente¹⁵¹, es por este motivo que se tomara como referencia una metodología propuesta para la optimización de columnas de destilación extractiva, como un procedimiento sistemático:¹⁵²

¹⁴⁷ POWELL, M.J.D, The BOBYQA Algorithm for Bound Constrained Optimization without Derivatives. 2009 Report, Department of Applied Mathematics and Theoretical Physics, Cambridge University. DAMTP 2009/NA06.

¹⁴⁸ POWELL Ibid 19

¹⁴⁹ POWELL Ibid. 25

¹⁵⁰ POWELL Ibid. 19

¹⁵¹ CASTAÑEDA Op cit. p 6

¹⁵² DE FIGUEIRÊDO Op. cit. p. 345

1. Especificar el número de etapas para la columna
2. Utilizando el Módulo *Model Analysis/Optimization tool* la función objetivo, las variables independientes y dependientes, los rangos y la tolerancia permitida (0.001)
3. Utilizando el Módulo *Model Analysis/Constraint Tool* las restricciones con sus respectivas tolerancias (0.001)
4. Optimizar la cantidad de entrainer, después entrainer y reflujo (RR), luego Entrainer, reflujo y flujo de destilado
5. Modificar el número de etapas y realizar el mismo procedimiento hasta obtener el menor valor posible.

La función objetivo que se utilizara para este caso es de carácter indirecto, esto quiere decir que se planteara una optimización con una función objetivo que aunque no tenga unidades de costos, es afectada y mejora los costos netos¹⁵³ para el esquema tecnológico. La función objetivo junto a sus respectivas restricciones son mostradas en la ecuación 21:

Ecuación 29. Problema de optimización planteado para la torre de destilación extractiva

$$\begin{aligned} \text{Min } J &= \frac{Q_R}{D} \\ \text{s. a.} \\ x_{ETOH}^{cimas} &\geq 0.995 \\ x_{ETOH}^{fondos} &\leq 0.002 \end{aligned}$$

Fuente: Elaboración propia

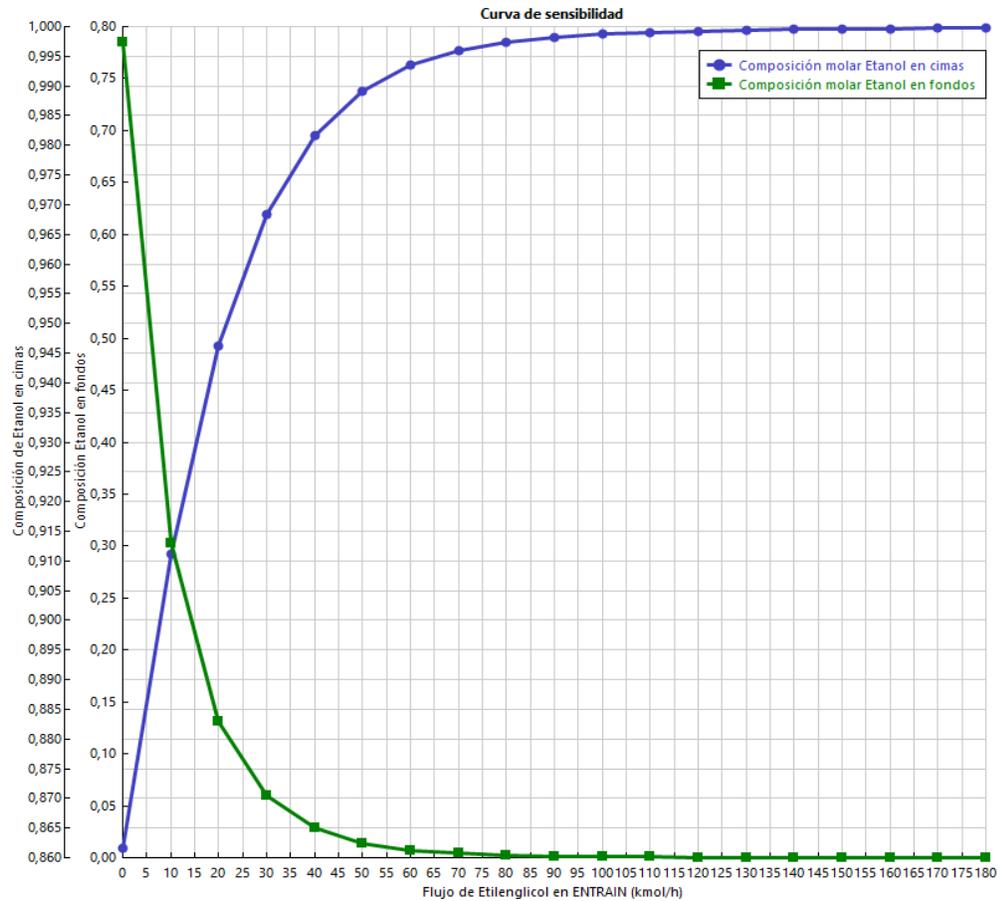
Para este caso se aplicará una optimización solo a la torre de destilación extractiva, esto por su gran consumo energético en comparación a la columna de recuperación, por tal motivo, se plantea la hipótesis que, si se optimiza dicha torre, el esquema puede mejorar su consumo energético.

4.3.1 Análisis de sensibilidad Como ya se ha venido tratando, el análisis de sensibilidad nos puede brindar información útil al momento de darle un punto inicial al algoritmo de optimización¹⁵⁴, es por esto que se realiza un análisis de sensibilidad para el reflujo, el solvente y el flujo de destilado de la columna. Esto se hará bajo la premisa de parametrizar dos propiedades a la vez, como primera iteración, se buscará la parametrización del reflujo molar a 0,6, los resultados obtenidos pueden ser mostrados en la Figura 8:

¹⁵³ DE FIGUEREDO Op. cit. Pp. 343

¹⁵⁴ TOVAR Op cit. p. 65

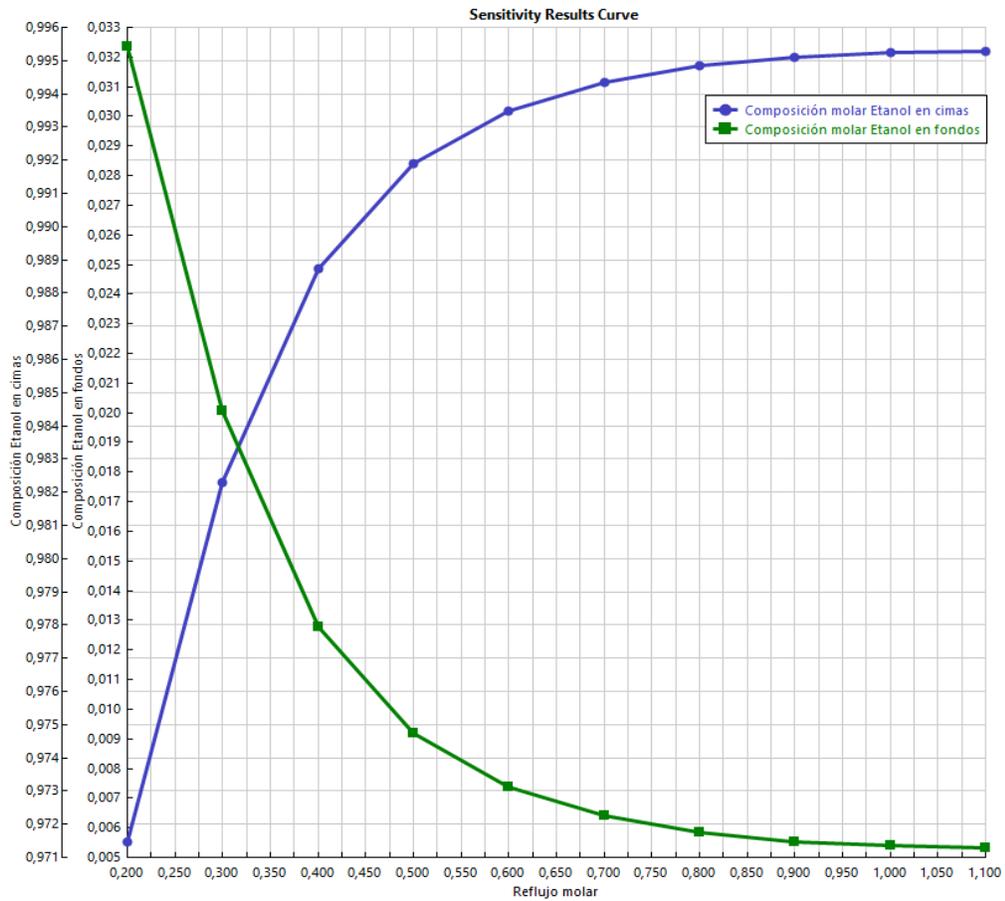
Figura 8. Análisis de sensibilidad para la cantidad de solvente de la destilación extractiva parametrizando el reflujo a 0,6 y el flujo de destilado a 85 kmol/h



Fuente: Elaboración propia con apoyo a ASPEN PLUS v.9 ®

Como se puede observar, desde más de 60 kmol/h de etilenglicol alimentado a la torre de destilación la composición en ambas partes no cambia mucho, según la restricción, debe ser más al 99.5% de Etanol, por ente el primer criterio de inicio es de Entrainer a 60 kmol/h, paso siguiente se buscara el punto inicial para el reflujo de la torre de destilación, por ende se tomara a 60 kmol/h y 85 kmol/h de flujo de solvente y destilado respectivamente.

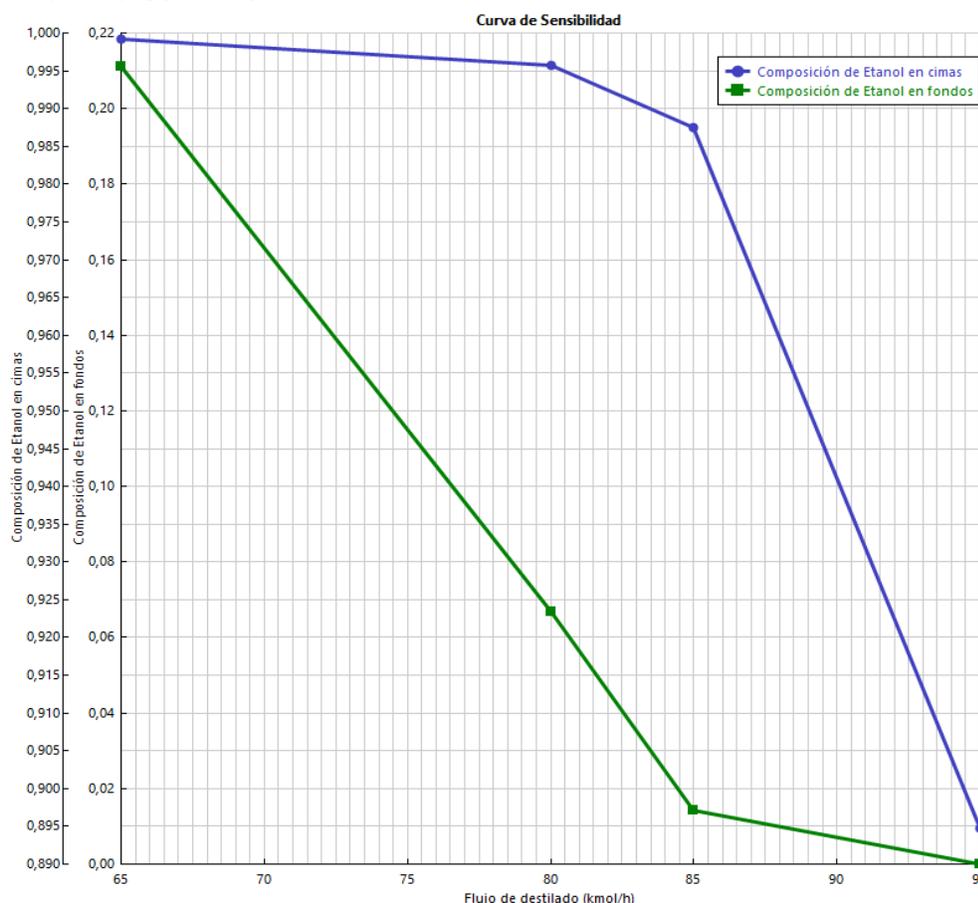
Figura 9. Análisis de sensibilidad para el reflujo de la destilación extractiva parametrizando el flujo de destilado a 85 kmol/h y la cantidad de solvente de 60 kmol/h.



Fuente: Elaboración propia con apoyo a ASPEN PLUS v.9 ®

El reflujo tiene un comportamiento muy parecido a lo que es la cantidad de solvente, a mayor reflujo, la cantidad de etanol purificado va a ser mayor, y es aquí donde ya se puede ver que la restricción la cual dará problema será la de fondos. Aunque al final esta deberá ser satisfecha completamente por el algoritmo de optimización, es por esto que se tomara 0,8 como el punto de inicio para la optimización. Ahora se parametrizarán las dos variables encontradas, y se buscara el comportamiento con el flujo de destilado para así pasar al problema de optimización como tal.

Figura 10. Analisis de sensibilidad para el flujo de destilado de la destilación extractiva parametrizando reflujo a 0,8 y la cantidad de solvente a 60 kmol/h.



Fuente: Elaboración propia con apoyo en ASPEN PLUS v.9 ®

El comportamiento del flujo de destilado es algo peculiar, el punto de decrecimiento extremo de composición es a destilados mayores de 85 kmol/h, es por esto que el punto inicial que se tomara es de 60 kmol/h de flujo de etilenglicol, 0.8 de reflujo molar y 85 kmol/h de destilado, esto será tomado para el desarrollo de los modelos de optimización.

4.3.2 Resultados de la optimización Al correr el solver del optimizador SQP se puede observar un comportamiento peculiar al problema de diseño, esta función objetivo puede ser resuelta sin la restricción de cimas debido a que los valores cercanos a dichas variables no afectan del todo está composición¹⁵⁵ (afectan a la 4

¹⁵⁵ DE FIGUEREIDO, Op. Cit. p. 15

cifra). En la tabla 18, se pueden observar los valores obtenidos para cada una de las variables al realizar la optimización pertinente.

Tabla 12. Resultados de la optimización SQP con la función objetivo de carácter térmico

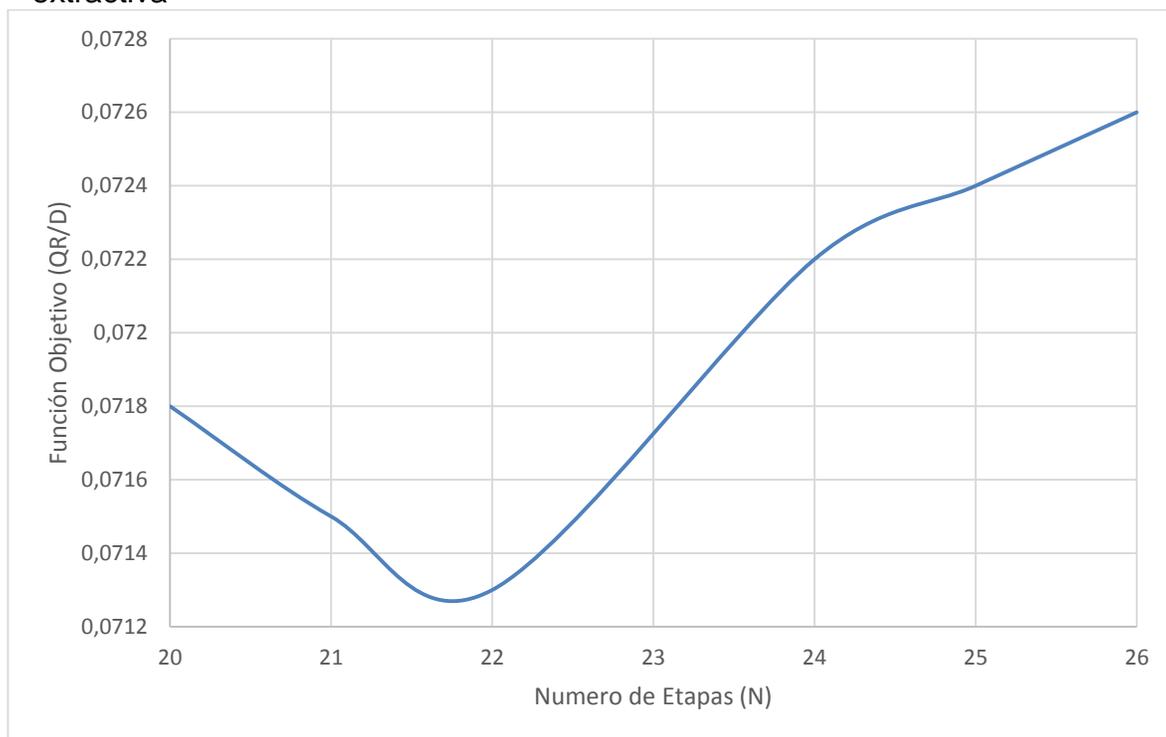
Variable	Valor Optimizado			
	Original	S	S y RR	S, RR y D
Flujo de Entrainer (S)	60	77.5	98.96	86.76
Reflujo molar (RR)	0.8	0.8	0.405	0.351
Flujo destilado (D)	85	85	85	85.23
Función obj. (Q_R/D)	0.084	0.087	0.076	0.072
Etanol en cimbras (XD)	0.995	0.998	0.997	0.995
Etanol en fondos (XB)	0.05	0.002	0.002	0.002

Fuente: Elaboración propia

Para 24 etapas de la columna de destilación extractiva el valor mínimo que puede ofrecer la función objetivo es de 0.072, aumentando la cantidad de solvente en 44.6%, así mismo, se reduce el reflujo en un 43.9% haciendo que a su vez el diámetro de la columna disminuya hasta 0.782 m, con ello efectuando una mejora en los costos de inversión; De manera análoga el flujo de destilado aumento en una manera casi despreciable, esto puede ser explicado bajo su análisis de sensibilidad, si se disminuye su efecto con la composición no es apreciable, pasa lo mismo cuando de aumento se habla.

Con lo anterior el paso 4 de la metodología esta completa, ahora lo que queda es volver a realizar los pasos 1 a 4 para diferente número de etapas, los resultados de estas pueden ser consultados en la Tabla 16 del Anexo F, donde se pueden encontrar los valores resultantes. Para la función objetivo presente, la representación gráfica es mostrada por la figura 8, en donde se corrobora que existe un punto mínimo:

Figura 11. Optimización para el número de etapas en la columna de destilación extractiva



Fuente: Elaboración propia

Podemos asimilar que para que la columna presente un consumo menor se debe hacer una columna de 22 etapas, de la cual se deba alimentar 86.76 kmol/h de etilenglicol a un reflujo de 0.338 y un flujo de destilado de 8.23 kmol/h, esto es basado en que aunque tenga una tendencia a tener un punto mínimo entre 21 y 22 etapas, se debe tener la premisa de que el número de etapas debe ser un número entero positivo.

4.3.3 Análisis Post-Optimización. No todas las funciones objetivas desembocan a la una solución que mejore el sistema, esto depende netamente de la clase de función objetivo que se plantee¹⁵⁶, es por esto que las superficies de respuesta con parámetros adyacentes a la optimización proporcionan una gran herramienta al momento de observar los cambios presentes para la optimización¹⁵⁷. Debido que para este caso se están trabajando 3 variables optimizables, es complejo mostrar una gráfica en 4 dimensiones, geométricamente esto sería muy parecido a una pirámide o un tetraedro. Pero al realizar la optimización por etapas y el análisis de sensibilidad para la variable de flujo de destilado (D), se puede observar que este

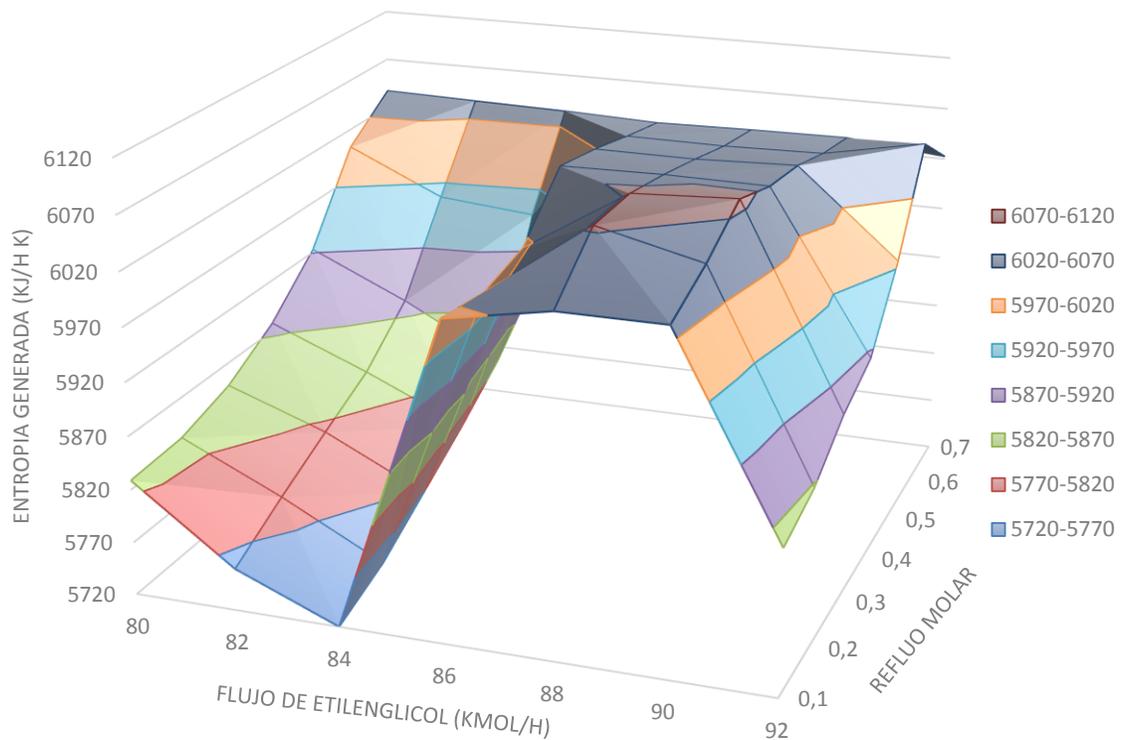
¹⁵⁶ CASTAÑEDA Op cit. p 8

¹⁵⁷ CUETARA RICARDO, Joaquín Raúl y HOWLAND ALBEAR, Juan José. Empleo de la metodología de superficies de respuesta para determinar el factor k de las puzolanas naturales y su influencia en la durabilidad de los hormigones. 2018 En: HORMIGÓN Y ACERO. Aug 2018

valor a lo largo de la optimización se convierte casi que constante en 85.23 kmol/h, por tal motivo, las variables que generan cambios significativos al sistema son el reflujo y el destilado, por tal motivo todas las superficies de respuesta serán calculadas para el reflujo (RR) y el flujo de etilenglicol (S).

- Generación de entropía** La generación de entropía es un parámetro que generalmente puede ser utilizado para identificar las eficiencias desde un calculo sencillo, este puede ser calculado por medio de un balance de entropía alrededor de un sistema. A mayor entropía generada, el sistema tendrá mas perdida de energía o, en otras palabras, mayor destrucción de exergía (Remítase a la ecuación 5). Por tal motivo una superficie de esta función será de gran utilidad para buscar la minimización de exergía destruida, y por ende hacer un parámetro que tenga como respuesta un parámetro referente a la termoeconomía. La superficie obtenida es mostrada en la figura 9.

Figura 12. Superficie de respuesta para la generación de entropía en un rango amplio de operación

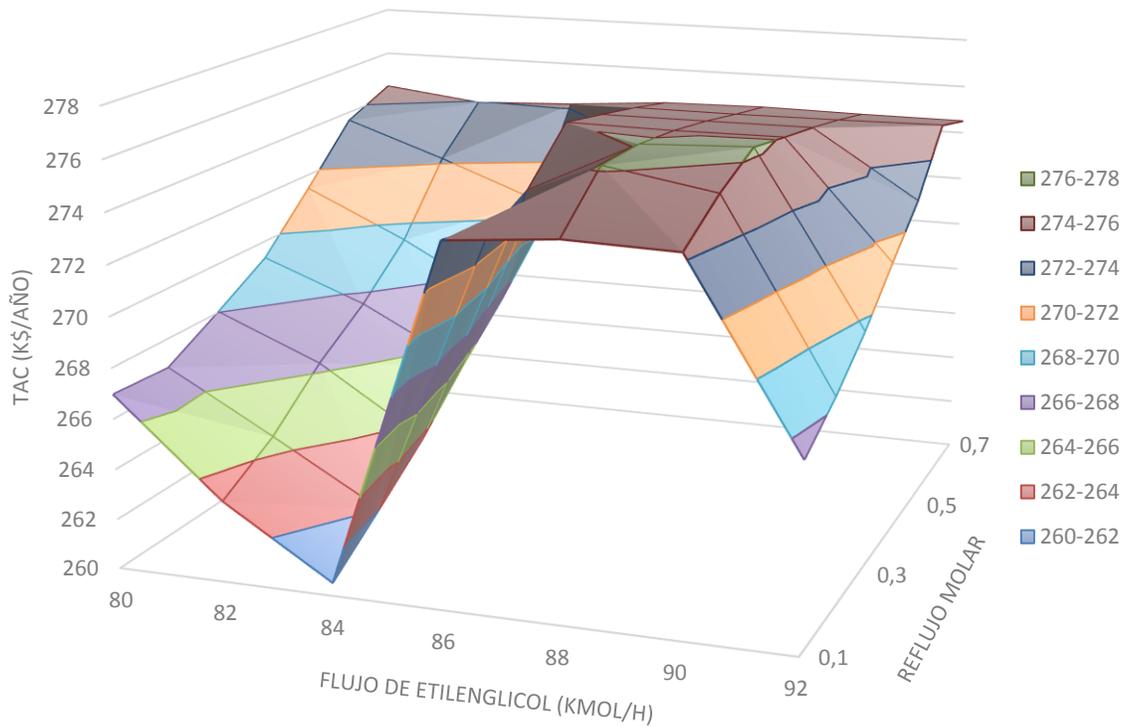


Fuente: Elaboración propia

Al observar el comportamiento de la entropía, podemos ver que para las condiciones óptimas obtenías a partir del modelo SQP, se puede obtener un pico donde la entropía es mínima, en otras palabras, la perdida de trabajo al operar la torre en este punto es la mínima posible para el sistema.

- Costo total Anualizado** El verdadero costo de inversión en la torre por servicios térmicos y por tamaño de la torre es un parámetro fundamental a la hora de optimizar, mientras el costo sea más alto, la amortización será más compleja, es por esto que el tener en cuenta el costo total anualizado es importante más para un esquema de destilación, así mismo, los resultados obtenidos son mostrados en la Figura 10:

Figura 13. Superficie de respuesta para el costo total anualizado (TAC) para el sistema en un amplio rango de operación



Fuente: Elaboración propia

Al notar cada una de las pendientes representativas para la superficie de respuesta, se puede notar un comportamiento un tanto peculiar, para una cantidad de solvente entre 86 y 90 el TAC aumenta y presentan los datos máximos. A su alrededor disminuyen los costos y en un valor de 84 kmol/h se obtiene la línea mínima, esto es debido a los servicios de calentamiento, aunque a mayor cantidad de flujo alimentado, mayor diámetro, los costos de calentamiento pueden traducirse en una mayor cantidad de etilenglicol que necesita ser evaporado y mayor cantidad de etanol purificado, en otras palabras, el costo energético supera en creces a los valores de construcción. Para el TAC coincidentalmente también se corrobora que el punto óptimo para el sistema puede ser parecido al punto óptimo obtenido por el método SQP.

4.3.4 Valor termoeconómico por pérdidas exergéticas como parámetro de post optimización En la sección 3.4.1 se comenta una manera de tomar un parámetro con el costo de pérdida de disponibilidad para un análisis post-optimización. Este valor puede ser traducido en que tanto dinero se puede estar perdiendo por trabajo el trabajo perdido del sistema. Si se obtiene un valor menor a al esquema original se podría concluir que tiene una mejora de carácter termoeconómica, en otras palabras, debe realizarse de nuevo la metodología termoeconómica para volver a calcular los costos exergéticos, los resultados de esta metodología pueden ser consultados en el Anexo G Tabla 19.

Un costo termoeconómico por pérdida exergética menor es traducido en un mejor aprovechamiento energético, las irreversibilidades disminuyen y con ello aumentando el aprovechamiento energético, los resultados obtenidos para el costo termoeconómico son mostradas en la Tabla P, donde se puede observar una clara mejora del esquema tecnológico, esto se debe básicamente a que la función objetivo al ser dependiente del calor de rehervección, se vuelve dependiente de la generación de entropía, y a su vez, del trabajo perdido para el sistema en los entornos. Con esto se concluye los análisis post optimización, y con ello se obtiene una mejora considerable para el sistema optimizando la columna de destilación extractiva.

Tabla 13. Comparación de valor de pérdida exergética para el esquema original y optimizado

Esquema	π_d^* (U\$/s)
Original	2.66
Optimizado	1.56

Fuente: Elaboración propia

Una reducción del 41.35% del costo de exergía destruida es un parámetro el cual puede afirmar una mejora para el esquema tecnológico, y no está de más, el esquema disminuye las cargas calóricas por rehervección y condensación, mejora el precio de los equipos, se obtiene etanol a un precio exergetico más bajo.

5. CONCLUSIONES

- La identificación de parámetros por medio de búsquedas literarias lleva al diseño de un esquema tecnológico para la producción de etanol carburante con una pureza del 99% molar, agua residual al 72% molar de agua y un reciclaje de solvente del 99,9% molar de etilenglicol.
- La mayor pérdida de trabajo puede ser encontrada en la torre de destilación extractiva, siendo esta el 66% de la pérdida de trabajo total del sistema, seguido de la torre de destilación de recuperación con el 24% de pérdida de trabajo total del sistema y el restante por el intercambiador de calor.
- Bajo el análisis económico, se puede determinar el costo total anualizado de 492,14 miles de dólares por cada año, la mayor contribución entre todos los equipos es dada por la torre de destilación extractiva con un valor de 126.812 dólares.
- Gracias al análisis termoeconómico, se identifica que el producto con mayor valor energético es el etanol carburante, con un precio 10,86 dólares por cada GJ de energía proporcionada, esto puede ser interpretado como la corriente más cara en términos energéticos.
- Al optimizar la columna de destilación extractiva con una función objetivo de carácter térmico, se obtiene una mejora operacional donde se destaca la minimización de etapas teóricas (de 24 a 22) y el uso de fluidos de servicio.
- Al optimizar el esquema tecnológico, se logra disminuir en 41,35% el valor termoeconómico por pérdidas exergéticas, disminuyendo el precio exergético del etanol carburante y por lo consiguiente, aumentando la eficiencia energética del esquema tecnológico.

6. RECOMENDACIONES

- Aplicar la misma metodología del presente documento mejorando el esquema tecnológico con una torre de destilación de pared dividida, térmicamente acoplada, entre otras.
- Comparar el reciente estudio con diferentes solventes, con ello llegando al solvente óptimo para el sistema agua-etanol, con un parámetro de minimización termoecónomica.
- Optimizar el proceso al plantear una función objetivo de carácter termoecónomico y si es posible, un paquete de restricciones operacionales más amplia que la utilizada, así mismo, la optimización de todos los equipos requeridos para el esquema tecnológico.
- Plantear una integración térmica del sistema por medio de metodologías de precalentamiento, distribución de servicios de alta presión a media y bajo, enfriamiento con corrientes del proceso.
- Determinar un esquema tecnológico en donde se pueda simular completamente desde la fermentación de la materia prima, el almacenamiento y preconcentración, la purificación del etanol con el motivo de aplicar la metodología termoecónomica y determinar la eficiencia del proceso.

BIBLIOGRAFIA

AHMADI, Pouria and REZAIE, Behnaz. Work Availability and Exergy Analysis. ENTROPY. Aug 10,.vol. 20, no. 8, p. 597

ALKORTA, Ibon; ROZAS, Isabel and ELGUERO, José. Non-conventional hydrogen bonds. En: CHEMICAL SOCIETY REVIEWS. -01-01.vol. 27, no. 2, p. 163-170

AMROLLAHI, Zeinab; ERTESVÅG, Ivar S. and BOLLAND, Olav. Optimized process configurations of post-combustion CO₂ capture for natural-gas-fired power plant— Exergy analysis. INTERNATIONAL JOURNAL OF GREENHOUSE GAS CONTROL. Nov.vol. 5, no. 6, p. 1393-1405

AN, Yi, et al. Design/optimization of energy-saving extractive distillation process by combining preconcentration column and extractive distillation column. En: CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE. Oct 2,.vol. 135, p. 166-178

BOEHM, Barry W. Software engineering economics. 7.print. ed. Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1981. ISBN 0138221227

BRITO, K. D., et al. Economic evaluation of energy saving alternatives in extractive distillation process. COMPUTERS AND CHEMICAL ENGINEERING. Oct 4,.vol. 93, p. 185-196

CANTOR TOVAR, Nataly Tatiana. Análisis exergético y de segunda ley del esquema tecnológico para la producción de etanol anhidro por destilación extractiva. Fundación Universidad de América, 2018. p. 15-26.

CARAPPELLUCCI, Roberto and GIORDANO, Lorena. A comparison between exergetic and economic criteria for optimizing the heat recovery steam generators of gas-steam power plants. ENERGY. Sep 1,.vol. 58, p. 458-472

CARDONA, Carlos A. and SÁNCHEZ, Óscar J. Fuel ethanol production: Process design trends and integration opportunities. BIORESOURCE TECHNOLOGY. vol. 98, no. 12, p. 2415-2457

CASTAÑEDA J. D., “Optimización de una torre de destilación reactiva para la producción de etilenglicol con base a una función objetivo de carácter térmico”. 2019 Revista de semilleros universidad de america.

ÇENGEL, Yunus A. and BOLES, Michael A. Termodinámica (8a. ed.). Mexico City: McGraw-Hill Interamericana, 2015.

ÇETIN, Murat; YÜKSEL, Fikret and KUŞ, Hüsamettin. Emission characteristics of a converted diesel engine using ethanol as fuel. ENERGY FOR SUSTAINABLE DEVELOPMENT. vol. 13, no. 4, p. 250-254
Congreso de Colombia. Ley 939. Dic 31, p. 1-9

CUETARA RICARDO, Joaquín Raúl and HOWLAND ALBEAR, Juan José. Empleo de la metodología de superficies de respuesta para determinar el factor k de las puzolanas naturales y su influencia en la durabilidad de los hormigones. HORMIGÓN Y ACERO. Aug.

CUI, Wenzhi; ZHOU, Shiyu and LIU, Xiangyang. Optimization of design and operation parameters for hybrid ground-source heat pump assisted with cooling tower. ENERGY & BUILDINGS. Jul 15, vol. 99, p. 253-262

DE FIGUEIRÊDO, Marcella Feitosa, et al. Optimal design of extractive distillation columns—A systematic procedure using a process simulator. CHEMICAL ENGINEERING RESEARCH AND DESIGN. March 1, vol. 89, no. 3, p. 341-346
DEMIREL, Yasar. Nonequilibrium thermodynamics. 3. ed. ed. Amsterdam [u.a.]: Elsevier, 2014. ISBN 0444595570

DENTONI, Marta, et al. A simulation/optimization study to assess seawater intrusion management strategies for the Gaza Strip coastal aquifer (Palestine). HYDROGEOLOGY JOURNAL. Mar. vol. 23, no. 2, p. 249-264

DOUGLAS, James M. Conceptual design of chemical processes. Boston [u.a.]: McGraw-Hill, 1988. ISBN 9780070177628

EDGAR, Thomas F.; HIMMELBLAU, David Mautner and LASDON, Leon S. Optimization of chemical processes. 2. ed. ed. Boston [u.a.]: McGraw-Hill, 2001. ISBN 9780071189774

ESQUIVEL, S. C.; FERRERO, S. W. and GALLARD, R. H. Parameter Settings and Representations in Pareto-Based Optimization for Job Shop Scheduling. CYBERNETICS AND SYSTEMS. September 1, vol. 33, no. 6, p. 559-578

FERNANDEZ RAMIREZ, Juan Sebastian. ANÁLISIS TERMOECONÓMICO DE UN PROCESO DE PRODUCCIÓN DE BIODIESEL QUE OPERA DE MANERA CONVENCIONAL Y POR DESTILACIÓN REACTIVA. Fundación Universidad de América, 2018.

FIEG, G. Distillation Design and Control Using Aspen Simulation. Von W. L. Luyben. CHEMIE INGENIEUR TECHNIK. 2016 Mar. vol. 87, no. 3, p. 312

GARCÍA-HERREROS, Pablo, et al. Optimization of the Design and Operation of an Extractive Distillation System for the Production of Fuel Grade Ethanol Using

Glycerol as Entrainer. INDUSTRIAL & ENGINEERING CHEMISTRY RESEARCH. April 6,.vol. 50, no. 7, p. 3977-3985

GIL CHAVES, Iván Darío, *et al.* Process Analysis and Simulation in Chemical Engineering. 1st ed. 2016 ed. Cham: Springer International Publishing, 2016. ISBN 3319148117

GIL, I. D.; GARCÍA,L. C. and RODRÍGUEZ,G. Simulation of ethanol extractive distillation with mixed glycols as separating agent. BRAZILIAN JOURNAL OF CHEMICAL ENGINEERING. 03/.vol. 31, no. 1, p. 259-270

GUTIÉRREZ-GUERRA, Roberto; SEGOVIA-HERNÁNDEZ,Juan Gabriel and HERNÁNDEZ,Salvador. Reducing energy consumption and CO2 emissions in extractive distillation. CHEMICAL ENGINEERING RESEARCH AND DESIGN. Feb.vol. 87, no. 2, p. 145-152

HURLBERT, Glenn H. Linear optimization. New York [u.a.]: Springer, 2010. ISBN 0387791485

INSTITUTO COLIMBIANO DE NORMAS TECNICAS T CERTIFICACIÓN. Compendio de normas para trabajos escritos. NTC-1486-6166. Bogotá D.C.: El instituto, 2018. ISBN 9789588585673 153 p.

JIMÉNEZ BERNAL,José Alfredo and Gutiérrez Torres, Claudia del Carmen. Termodinámica. México, D.F: Grupo Editorial Patria, 2014. ISBN 6074380597

LEVINE, Ira N. Principios de fisicoquímica (6a. ed.). México, D.F: McGraw-Hill Interamericana, 2014. ISBN 6071509882

LOPEZ NAVARRO,Derly Lorena. Evaluación energética de esquemas tecnológicos para la producción de etanol anhidro por destilación extractiva. Fundación Universidad de América, 2017.

LOZANO, M. A. and VALERO,A. Theory of the exergetic cost. ENERGY. vol. 18, no. 9, p. 939-960

MEIRELLES, Antonio; WEISS,Siegfried and HERFURTH,Herbert. Ethanol dehydration by extractive distillation. JOURNAL OF CHEMICAL TECHNOLOGY & BIOTECHNOLOGY. -01-01.vol. 53, no. 2, p. 181-188

MIELENZ, Jonathan R. Ethanol production from biomass: technology and commercialization status. [0]:England: Elsevier Ltd, 2001. 324-329 ISBN 1369-5274.

MINESTIO DE MINAS Y MEDIO AMBIENTE. Ley 693; Sep 19, 2018.

MINISTERIO DE MINAS Y ENERGIA. Ley 1715 May 13 de 2014.

MINISTERIO DE MINAS Y ENERGIA. Resolución 180687; Mayo 2014

MINISTERIO DE MINAS Y ENERGIA. Resolución 40626;

MINISTERIO DE MINAS Y ENERGIA. Resolución 40185 Feb 27 de 2018.

MINISTERIO DE MINAS Y ENERGÍA. Decreto 1135 de 2009.

MODESTO, Marcelo; ZEMP, Roger J. and NEBRA, Sílvia A. Ethanol Production from Sugar Cane: Assessing the Possibilities of Improving Energy Efficiency through Exergetic Cost Analysis. HEAT TRANSFER ENGINEERING. Mar 1, .vol. 30, no. 4, p. 272-281

MORAN, Michael J.; SHAPIRO, Howard N. and BOETTNER, Daisie D. Principios de termodinámica para ingeniería (7a. ed.). São Paulo: Grupo Gen - LTC, 2013. ISBN 8521622120

MONTES, J. M., GARCÍA, J. G., QUEROL, E. Termoeconomía y optimización energética. 2009. España: Ediciones Peninsular. (montes, 2009)

NITHYANANDAM, K. and PITCHUMANI,R. Cost and performance analysis of concentrating solar power systems with integrated latent thermal energy storage. ENERGY. Jan 1, .vol. 64, p. 793-810

NOCEDAL, Jorge and WRIGHT, Stephen J. Numerical optimization. [0]. New York [u.a.].

PROCHAZKA, Hynek. Multivariable robust digital controller design by convex optimization. [0]:HAL CCSD, 2004.

QUEROL, E., et al. Novel application for exergy and thermoeconomic analysis of processes simulated with Asp Plus. ENERGY. vol. 36, no. 2, p. 964-974

SADRI, Somayyeh; KHOSHKHOO, Ramin Haghghi and AMERI, Mohammad. Optimum exergoeconomic modeling of novel hybrid desalination system (MEDAD+RO). ENERGY. Apr 15, .vol. 149, p. 74-83

SARKHEL, Debarati, et al. Studies on separation characteristics and pseudo-equilibrium relationship in pervaporation of benzene–cyclohexane mixtures through composite PVA membranes on PAN supports. SEPARATION AND PURIFICATION TECHNOLOGY. vol. 30, no. 1, p. 89-96

SARNO, D. Evans. Acetonitrile as an Extractive Distillation Solvent. World Petroleum Congress, 1967-01-01.

SCHEFFLAN, Ralph. Teach Yourself the Basics of Aspen Plus. Second edition. ed. US: AIChE/Wiley Press, 2016. ISBN 9781118980590

SEADER, Junior D.; HENLEY, Ernest J. and ROPER, Donald Keith. Separation process principles. 3. ed ed. Hoboken, N.J: Wiley, 2011. ISBN 0470481838

SILVA LARROTTA, Jorge René. La termoeconomía como alternativa para mejorar la competitividad industrial. CRITERIO LIBRE. Dec 1,.vol. 12, no. 21, p. 97

SILVA LARROTTA, Jorge René. La termoeconomía como alternativa para mejorar la competitividad industrial. 2015.

SUCKSMITH, I. Extractive distillation saves energy. [0]:United States: 1982. 91-95

SUN, Ye and CHENG, Jiayang. Hydrolysis of lignocellulosic materials for ethanol production: a review. [0]:England: Elsevier Ltd, 2002. 1-11 ISBN 0960-8524.

TAHA, Hamdy. Investigación De Operaciones. 7ma ed. Pearson Educación de México, S.A. de C.V, 2011.

SZARGUT, Jan. Exergy method technical and ecological applications. 1st ed. WIT Press, 2005

TREYBAL, Robert E. Operaciones de transferencia de masa (2a. ed.). México: McGraw-Hill Interamericana, 2000. ISBN 9789686046342

TURTON, Richard. Analysis, synthesis, and design of chemical processes. 4., rev. ed. ed. Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall, 2012.

URAGAMI, Tadashi, et al. Dehydration of an Ethanol/Water Azeotrope by Novel Organic-Inorganic Hybrid Membranes Based on Quaternized Chitosan and Tetraethoxysilane. BIOMACROMOLECULES. July 1,.vol. 5, no. 4, p. 1567-1574

UYAZÁN, Ana María, et al. Producción de alcohol carburante por destilación extractiva: simulación del proceso con glicerol. Jul 2,.

UYAZÁN, et al. Ingeniería e Investigación ISSN: 0120-5609 revii_bog@unal.edu.co Universidad Nacional de Colombia Colombia. [1]:Universidad Nacional de Colombia, 2004.

VALERO, Antonio. Termoeconomía: El punto de encuentro de la Termodinámica, la Economía y la Ecología. BOLETÍN CF+S. May 20,.vol. 0, no. 5,

VAN WYLEN, Gordon J.; BORGNAKKE, Claus and SONNTAG, Richard Edwin. Fundamentals of classical thermodynamics. 4. ed. ed. New York [u.a.]: Wiley, 1994. ISBN 9780471593959

VÁSQUEZ, CÉSAR, et al. PRODUCCIÓN DE ETANOL ABSOLUTO POR DESTILACIÓN EXTRACTIVA COMBINADA CON EFECTO SALINO. DYNA. Mar 1, .vol. 74, no. 151, p. 53-59

WHEALS, Alan E., et al. Fuel ethanol after 25 years. TRENDS IN BIOTECHNOLOGY. vol. 17, no. 12, p. 482-487

WORRELL, E., et al. Energy consumption by industrial processes in the European Union. ENERGY. vol. 19, no. 11, p. 1113-1129

XIA, Younan, et al. Unconventional Methods for Fabricating and Patterning Nanostructures. CHEMICAL REVIEWS. July 1, .vol. 99, no. 7, p. 1823-1848

YANG, Xiao-Ling and WARD, Jeffrey D. Extractive Distillation Optimization Using Simulated Annealing and a Process Simulation Automation Server. INDUSTRIAL & ENGINEERING CHEMISTRY RESEARCH. Aug 15, .vol. 57, no. 32, p. 11050-11060

ZHU, Zhaoyou, et al. Separation of acetonitrile/methanol/benzene ternary azeotrope via triple column pressure-swing distillation. SEPARATION AND PURIFICATION TECHNOLOGY. Sep 1, .vol. 169, p. 66-77

ANEXOS

ANEXO A.
PSEUDO EQUILIBRIOS DE FASES PARA EL SISTEMA ETANOL AGUA
ETILENGLICOL

Tabla 14. Datos para el pseudo equilibrio de fases para etanol agua etilenglicol modelado por NRTL (γ) y RK (φ)

S/F= 0%		S/F= 20%		S/F = 40%		S/F= 60%	
X _{etanol}	Y _{etanol}						
0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
0,183	0,020	0,165	0,020	0,148	0,020	0,127	0,020
0,290	0,040	0,273	0,040	0,254	0,040	0,227	0,040
0,359	0,060	0,350	0,060	0,335	0,060	0,309	0,060
0,408	0,080	0,406	0,080	0,398	0,080	0,375	0,080
0,443	0,100	0,450	0,100	0,449	0,100	0,431	0,100
0,471	0,120	0,485	0,120	0,490	0,120	0,478	0,120
0,492	0,140	0,514	0,140	0,525	0,140	0,518	0,140
0,510	0,160	0,538	0,160	0,555	0,160	0,553	0,160
0,524	0,180	0,559	0,180	0,581	0,180	0,584	0,180
0,537	0,200	0,577	0,200	0,603	0,200	0,611	0,200
0,548	0,220	0,593	0,220	0,624	0,220	0,635	0,220
0,558	0,240	0,608	0,240	0,642	0,240	0,657	0,240
0,566	0,260	0,621	0,260	0,658	0,260	0,676	0,260
0,575	0,280	0,633	0,280	0,673	0,280	0,694	0,280
0,582	0,300	0,644	0,300	0,687	0,300	0,711	0,300
0,590	0,320	0,655	0,320	0,700	0,320	0,726	0,320
0,597	0,340	0,665	0,340	0,713	0,340	0,740	0,340
0,604	0,360	0,675	0,360	0,724	0,360	0,753	0,360
0,611	0,380	0,684	0,380	0,735	0,380	0,766	0,380
0,618	0,400	0,694	0,400	0,746	0,400	0,777	0,400
0,626	0,420	0,703	0,420	0,756	0,420	0,788	0,420
0,633	0,440	0,711	0,440	0,766	0,440	0,799	0,440
0,640	0,460	0,720	0,460	0,775	0,460	0,809	0,460
0,648	0,480	0,729	0,480	0,784	0,480	0,818	0,480
0,656	0,500	0,738	0,500	0,793	0,500	0,827	0,500
0,664	0,520	0,747	0,520	0,802	0,520	0,836	0,520
0,673	0,540	0,756	0,540	0,811	0,540	0,844	0,540
0,681	0,560	0,764	0,560	0,819	0,560	0,852	0,560
0,690	0,580	0,773	0,580	0,827	0,580	0,860	0,580
0,700	0,600	0,782	0,600	0,836	0,600	0,868	0,600
0,710	0,620	0,792	0,620	0,844	0,620	0,875	0,620

Tabla 14. (Continuación)

S/F= 0%		S/F= 20%		S/F = 40%		S/F= 60%	
X _{etanol}	Y _{etanol}						
0,720	0,640	0,801	0,640	0,852	0,640	0,883	0,640
0,731	0,660	0,810	0,660	0,860	0,660	0,890	0,660
0,742	0,680	0,820	0,680	0,868	0,680	0,896	0,680
0,753	0,700	0,830	0,700	0,876	0,700	0,903	0,700
0,765	0,720	0,840	0,720	0,884	0,720	0,910	0,720
0,778	0,740	0,850	0,740	0,892	0,740	0,916	0,740
0,791	0,760	0,860	0,760	0,900	0,760	0,923	0,760
0,805	0,780	0,870	0,780	0,908	0,780	0,929	0,780
0,819	0,800	0,881	0,800	0,916	0,800	0,935	0,800
0,834	0,820	0,892	0,820	0,923	0,820	0,941	0,820
0,849	0,840	0,903	0,840	0,931	0,840	0,947	0,840
0,865	0,860	0,914	0,860	0,939	0,860	0,953	0,860
0,882	0,880	0,925	0,880	0,947	0,880	0,959	0,880
0,900	0,900	0,937	0,900	0,955	0,900	0,965	0,900
0,918	0,920	0,948	0,920	0,963	0,920	0,970	0,920
0,937	0,940	0,960	0,940	0,971	0,940	0,976	0,940
0,957	0,960	0,972	0,960	0,979	0,960	0,982	0,960
0,978	0,980	0,984	0,980	0,987	0,980	0,987	0,980
1,000	1,000	0,996	1,000	0,995	1,000	0,993	1,000

Fuente: ASPEN PLUS v.9**Tabla 15.** Datos de equilibrio liquido vapor para el sistema etanol agua a 1 atm de presión

X _{etanol}	Y _{etanol}
0	0
0,04	0,29
0,075	0,4
0,12	0,475
0,23	0,55
0,341	0,595
0,512	0,657
0,542	0,665
0,662	0,733
0,76	0,792
0,86	0,87
1	1

Fuente: Rao, C. V.; Achary, M. V. R.; Narasinga Rao, M. Trans., Indian Inst. Chem. Eng., 1948, 2, Vapour-liquid equilibria of non-ideal solutions: II alcohol -water

ANEXO B.
CALCULOS EXERGETICOS PARA EL ESUQEMA TECNOLOGICO

Los cálculos exergéticos para el esquema tecnológico es uno de los pasos importantes. Estos se encontrarán a continuación:

- Para la columna de destilación extractiva

Aplicando la ecuación 11 se puede obtener que para la torre de destilación extractiva el trabajo perdido (LW) es:

$$LW = Q_c \left(1 - \frac{T_o}{T_c}\right) + Q_R \left(1 - \frac{T_o}{T_R}\right) + A_{AZE0+} + A_{ENTRAIN} - A_{ETOH} - A_{FEED2}$$

$$LW = -5.335 \frac{GJ}{h} \left(1 - \frac{298,15 K}{298.15 K}\right) + 6.473 \frac{GJ}{h} \left(1 - \frac{298.15 K}{448.15 K}\right) - 18.43 \frac{GJ}{h}$$

$$- 19.44 \frac{GJ}{h} + 14.88 \frac{GJ}{h} + 22.90 \frac{GJ}{h}$$

$$LW = 1.99 \frac{GJ}{h}$$

De manera análoga, con la ecuación 12 se puede obtener el trabajo mínimo de separación.

$$W_{min} = A_{AZE0+} + A_{ENTRAIN} - A_{ETOH} - A_{FEED2}$$

$$W_{min} = -18.43 \frac{GJ}{h} - 19.44 \frac{GJ}{h} + 14.88 \frac{GJ}{h} + 22.90 \frac{GJ}{h}$$

$$W_{min} = 0.17 \frac{GJ}{h}$$

Aplicando la ecuación 13, se obtiene la eficiencia energética de separación (o eficiencia energética):

$$\eta_{sep} = \frac{W_{min}}{W_{min} + LW} = \frac{0.17 \frac{GJ}{h}}{0.17 \frac{GJ}{h} + 1.99 \frac{GJ}{h}} = 0.074 \approx 7.4\%$$

- Para la columna de destilación de recuperación
Aplicando la ecuación 11 se puede obtener que para la torre de destilación recuperación el trabajo perdido (LW) es:

$$LW = Q_c \left(1 - \frac{T_o}{T_c}\right) + Q_R \left(1 - \frac{T_o}{T_R}\right) + A_{FEED2} - A_{WATER} - A_{EGLICOL}$$

$$LW = -1.542 \frac{GJ}{h} \left(1 - \frac{298,15 K}{298.15 K}\right) + 2.005 \frac{GJ}{h} \left(1 - \frac{298.15 K}{448.15 K}\right) - 22.90 \frac{GJ}{h}$$

$$- 19.44 \frac{GJ}{h} + 5.16 \frac{GJ}{h} + 17.52 \frac{GJ}{h}$$

$$LW = 0.64 \frac{GJ}{h}$$

De manera análoga, con la ecuación 12 se puede obtener el trabajo mínimo de separación.

$$W_{min} = A_{FEED2} - A_{WATER} - A_{EGLICOL}$$

$$W_{min} = -22.90 \frac{GJ}{h} - 19.44 \frac{GJ}{h} + 5.16 \frac{GJ}{h} + 17.52 \frac{GJ}{h}$$

$$W_{min} = 0.22 \frac{GJ}{h}$$

Aplicando la ecuación 13, se obtiene la eficiencia energética de separación (o eficiencia energética):

$$\eta_{sep} = \frac{W_{min}}{W_{min} + LW} = \frac{0.22 \frac{GJ}{h}}{0.22 \frac{GJ}{h} + 0.64 \frac{GJ}{h}} = 0.2585 \approx 25.85\%$$

- Para el intercambiador de calor

Aplicando la ecuación 11 se puede obtener que para la torre de destilación recuperación el trabajo perdido (LW) es:

$$LW = Q_c \left(1 - \frac{T_o}{T_c}\right) + A_{EGLICOL} - A_{RECY+}$$

$$LW = -1.095 \frac{GJ}{h} \left(1 - \frac{298,15 K}{298.15 K}\right) - 17.52 \frac{GJ}{h} + 17.82 \frac{GJ}{h}$$

$$LW = 0.3 \frac{GJ}{h}$$

Aplicando la ecuación de eficiencia de segunda ley para intercambiadores de calor, se obtiene¹⁵⁸:

$$\eta_{II} = \frac{\sum_{out} A_i}{\sum_{in} A_i} = \frac{-17.52 \frac{GJ}{h}}{-17.82 \frac{GJ}{h}} = 0.9832 \approx 98.32\%$$

- Para el mezclador

Aplicando la ecuación 11 se puede obtener que para la torre de destilación recuperación el trabajo perdido (LW) es:

$$LW = A_{RECY+} + A_{MAKEUP} - A_{ENTRIAN}$$

$$LW = -17.52 \frac{GJ}{h} - 1.61 \frac{GJ}{h} + 19.44 \frac{GJ}{h}$$

$$LW = 2.36 E^{-05} \frac{GJ}{h}$$

Aplicando la ecuación de eficiencia de segunda ley para mezcladores de calor, se obtiene¹⁵⁹:

$$\eta_{II} = \frac{\sum_{out} A_i}{\sum_{in} A_i} = \frac{-19.52 \frac{GJ}{h}}{-17.82 - 1.61 \frac{GJ}{h}} = 0.9999 \approx 99.99\%$$

¹⁵⁸ GHANNADZADEH, Ali. Exergetic balances and analysis in a Process Simulator: A way to enhance Process Energy Integration. 2013. p.141

¹⁵⁹GHANNADZADEH Ibid. p 142

ANEXO C. CALCULOS PARA EL DIMENSIONAMIENTO DE LAS COLUMNAS DE DESTILACIÓN

A continuación, se encontrarán los cálculos económicos para cada uno de las torres presentes en el esquema tecnológico, así mismo como para el intercambiador de calor. Por practicidad, los factores de conversión no serán mostrados, es por esto, el cambio de unidades:

- Calculas económicos para la torre de destilación extractiva:

Aplicando la ecuación 14 para el cálculo de área de intercambio térmico para condensador (C) y rehervidor (R)

$$A_C = \frac{1481.92 \text{ kW}}{0.852 \frac{\text{KW}}{\text{m}^2 \text{ K}} * 13.9 \text{ K}} = 125.162 \text{ m}^2$$

$$A_R = \frac{1797.92 \text{ kW}}{0.568 \frac{\text{KW}}{\text{m}^2 \text{ K}} * 34.8 \text{ K}} = 90.942 \text{ m}^2$$

Calculando los costos de los condensadores, reemplazando en la ecuación 17:

$$CC_C = 7,296 \frac{\$}{\text{m}^{1.2}} (125.162 \text{ m}^2)^{0.66} = 168,439 \$$$

$$CC_C = 7,296 \frac{\$}{\text{m}^{1.2}} (90.942 \text{ m}^2)^{0.66} = 136,862 \$$$

Remplazando la ecuación 13 y 16, el cilindro y las etapas se pueden calcular de la siguiente manera:

$$L = 1.2 * 0.69 \text{ m} * (24 - 2) = 16.104 \text{ m}$$

$$CC_T = 17,640 \frac{\$}{\text{m}^{1.2}} (0.846 \text{ m})^{1.066} (14.106 \text{ m})^{0.802} = 136,862 \$$$

Remplazando con los servicios correspondientes para la torre de destilación extractiva y reemplazando la ecuación P, se puede obtener:

$$CS = 1,797.92 \text{ kW} * 7.78 \frac{\$}{\text{GJ}} \approx 124,824 \frac{\$}{\text{año}}$$

$$CW = 1,481.92 \text{ kW} * 4.43 \frac{\$}{GJ} \approx 9,914.38 \frac{\$}{\text{año}}$$

Remplazando en la ecuación 15 para el cálculo de costo total anualizado:

$$TAC = \frac{168,439 \$ + 136,862 \$ + 136,862 \$}{3 \text{ años}} + 124,824 \frac{\$}{\text{año}} + 9,914.38 \frac{\$}{\text{año}} = 292.65 \frac{k\$}{\text{año}}$$

- Calculas económicos para la torre de destilación de recuperación:

Aplicando la ecuación 14 para el cálculo de área de intercambio térmico para condensador (C) y rehervidor (R)

$$A_C = \frac{428.285 \text{ kW}}{0.852 \frac{KW}{m^2 K} * 13.9 K} = 36.17 \text{ m}^2$$

$$A_R = \frac{557.07 \text{ kW}}{0.568 \frac{KW}{m^2 K} * 34.8 K} = 28.17 \text{ m}^2$$

Calculando los costos de los condensadores, remplazando en la ecuación 17:

$$CC_C = 7,296 \frac{\$}{m^{1.2}} (36.17 \text{ m}^2)^{0.66} = 75,167.9 \$$$

$$CC_C = 7,296 \frac{\$}{m^{1.2}} (28.17 \text{ m}^2)^{0.66} = 63,902.8 \$$$

Remplazando la ecuación 13 y 16, el cilindro y las etapas se pueden calcular de la siguiente manera:

$$L = 1.2 * 0.69 \text{ m} * (7 - 2) = 3.66 \text{ m}$$

$$CC_T = 17,640 \frac{\$}{m^{1.2}} (0.492 \text{ m})^{1.066} (3.66 \text{ m})^{0.802} = 23,438 \$$$

Remplazando con los servicios correspondientes para la torre de destilación extractiva y remplazando la ecuación P, se puede obtener:

$$CS = 428.285 \text{ kW} * 7.78 \frac{\$}{GJ} \approx 43,949.2 \frac{\$}{\text{año}}$$

$$CW = 557.07 \text{ kW} * 4.43 \frac{\$}{GJ} \approx 2,865.32 \frac{\$}{\text{año}}$$

Reemplazando en la ecuación 15 para el cálculo de costo total anualizado:

$$TAC = \frac{23,438 \$ + 63,902.8 \$ + 75,167.9 \$}{3 \text{ años}} + 43,949.2 \frac{\$}{\text{año}} + 2,865.32 \frac{\$}{\text{año}} = 118.23 \frac{k\$}{\text{año}}$$

- Calculas económicos para los intercambiadores de calor:

Aplicando la ecuación 14 para el cálculo de área de intercambio térmico para condensador (C)

$$A_c = \frac{304.171 \text{ kW}}{0.852 \frac{\text{KW}}{\text{m}^2 \text{K}} * 13.9 \text{ K}} = 212.598 \text{ m}^2$$

Calculando los costos de los condensadores, reemplazando en la ecuación 17:

$$CC_C = 7,296 \frac{\$}{\text{m}^{1.2}} (212.598 \text{ m}^2)^{0.66} = 237,683 \$$$

Reemplazando con los servicios correspondientes para la torre de destilación extractiva y reemplazando la ecuación P, se puede obtener:

$$CW = 304.17 \text{ kW} * 4.43 \frac{\$}{\text{Gj}} \approx 2.03 \frac{k\$}{\text{año}}$$

Reemplazando en la ecuación 15 para el cálculo de costo total anualizado:

$$TAC = \frac{237,683\$}{3 \text{ años}} + 2.03 \frac{\$}{\text{año}} = 81.26 \frac{k\$}{\text{año}}$$

**ANEXO D.
PLANTEAMIENTO DE ECUACIONES COSTOS EXERGETICOS PARA EL
ESQUEMA TECNOLOGICO**

Aquí se encontraran presentes la solución a las sumatorias presentadas en la ecuación 16, cabe destacar que para su correcta convergencia deben ser combinadas junto a las ecuaciones mostradas en el Anexo E.

- Torre de destilación extractiva

$$c_{AZE0+}A_{AZE0+} + c_{ENTRAIN}A_{ENTRIAN} - c_{ETOHc}A_{ETOHc} - c_{FEED2}A_{FEED2} + c_{QR}\psi_{QR} + c_{QC}\psi_{QC} = 0 \quad (a)$$

- Torre de destilación de recuperación

$$c_{FEED2}A_{FEED2} - c_{WATER}A_{WATER} - c_{EGLICOL}A_{EGLICOL} + c_{QR'}\psi_{QR'} + c_{QC'}\psi_{QC'} = 0 \quad (b)$$

- Intercambiador de calor

$$c_{EGLICOL}A_{EGLICOL} - c_{RECY+}A_{RECY+} + c_{COOLER}\psi_{COOLER} = 0 \quad (c)$$

- Mezclador

$$c_{MAKEUP}A_{MAKEUP} - c_{WATER}A_{WATER} - c_{ENTRAIN}A_{ENTRAIN} = 0 \quad (d)$$

Al resolver el sistema de ecuaciones conjuntas se pueden obtener los valores de los costos como:

Tabla 16. Resultados obtenidos para los costos exergéticos (c_i)

Corriente	c_i (U\$/GJ)
MAKEUP	1,00
RECY+	4,51
ENTRAIN	4,13
AZE0+	1,00
ETOHc	10,86
FEED2	3,51
EGLICOL	4,58
WATER	0,00
QC	9,98
QR	4,43
QC'	8,22
QR'	4,43
QCOOLER	4,43

Fuente: Elaboración propia

**ANEXO E.
PLANTEAMIENTO DE ECUACIONES COSTOS TERMOCONOMICOS PARA
EL ESQUEMA TECNOLÓGICO**

Aquí se encontrarán presentes la solución a las sumatorias presentadas en la ecuación 16, cabe destacar que para su correcta convergencia deben ser combinadas junto a las ecuaciones mostradas en el Anexo D.

- Torre de destilación extractiva

$$c_{AZEO+}\pi_{AZEO+} + c_{ENTRAIN}\pi_{ENTRAIN} - c_{ETOH}\pi_{ETOH} - c_{FEED2}\pi_{FEED2} + Z_{EXTR} = 0 \quad (a)$$

- Torre de destilación de recuperación

$$c_{FEED2}\pi_{FEED2} - c_{WATER}\pi_{WATER} - c_{EGLICOL}\pi_{EGLICOL} + Z_{REC} = 0 \quad (b)$$

- Intercambiador de calor

$$c_{EGLICOL}\pi_{EGLICOL} - c_{RECY+}\pi_{RECY+} + Z_{COOLER} = 0 \quad (c)$$

- Mezclador

$$c_{MAKEUP}\pi_{MAKEUP} - c_{WATER}\pi_{WATER} - c_{ENTRAIN}\pi_{ENTRAIN} = 0 \quad (d)$$

Al resolver el sistema de ecuaciones conjuntas se pueden obtener los valores de los costos como:

Tabla 17. Resultados obtenidos para los costos termoeconómicos (π_i)

Corriente	π_i (U\$/s)
MAKEUP	0,13
RECY+	0,42
ENTRAIN	0,40
AZEO+	0,14
ETOH	0,13
FEED2	0,36
EGLICOL	0,43
WATER	0,11

Fuente: Elaboración propia

ANEXO F.
TABLAS DE SUPERFICIES DE RESPUESTA PARA LA OPTIMIZACIÓN DE LA TORRE DE DESTILACIÓN EXTRACTIVA

- Valores extras útiles para la gráfica mostrado en la Figura 11.

Tabla 18. Valores extras para la optimización del número de etapas

N	QR/D (GJ/kmol)	S (kmol/h)	RR	D (kmol/h)	QR (GJ/h)
20	0,0718	88,05	0,337	85,23	6,119514
21	0,0715	87,86	0,338	85,23	6,093945
22	0,0713	86,74	0,339	85,23	6,076899
24	0,0722	86,76	0,351	85,23	6,153606
25	0,0724	87,29	0,34	85,24	6,171376
26	0,0726	81,24	0,398	85,24	6,188424

Fuente: Elaboración propia

- Valores determinados para la superficie de respuesta para la entropía generada:

Tabla 19. Valores calculados para la superficie de respuesta para la entropía generada

		RR						
		0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7
S	80	5828,51	5759,31	5714,68	6012,45	6030,31	6030,41	5853,68
	82	5831,89	5788,03	5738,55	6003,28	6073,49	6051,08	5867,08
	84	5847,89	5814,42	5768,14	6014,1	6073,71	6078,88	5896,6
	86	5877,34	5839,71	5797,97	6062,45	6064	6063,06	5914,49
	88	5922,45	5880,3	5831,27	6052,77	6052,37	6055,79	5975,09
	90	6001,71	5959,13	5950,71	6040,19	6039,46	6041,51	6060,09
	92	6036,61	6034,4	6032,45	6029,07	6030,82	6031,79	6022,67

Fuente: Elaboración propia

- Valores determinados para la superficie de respuesta para la función TAC generada:

Tabla 20. Valores calculados para la superficie de respuesta para la entropía generada

		RR						
		0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7
S	80	266,965	263,221	260,514	273,979	274,368	274,258	267,278
	82	266,836	264,469	262,021	273,141	276,145	275,432	268,313
	84	268,021	266,27	263,571	274,039	276,118	276,301	269,62
	86	269,287	267,671	265,477	275,903	275,851	275,879	271,244
	88	271,399	269,456	267,175	275,461	275,463	275,479	272,802
	90	273,631	272,187	270,612	275,003	274,992	275,024	275,086
	92	274,471	273,969	274,155	274,481	274,556	274,509	274,498

Fuente: Elaboración propia.

**ANEXO G.
COSTOS EXERGETICOS Y TERMOECONOMICOS PARA EL ESQUEMA
TECNOLOGICO OPTIMIZADO**

A continuación, se encontrarán los valores a los costos exergeticos y termoeconomicos para el esquema tecnologico con la optimización empleada, son desarrolladas bajo las metodologías presentadas en el anexo D y E respectivamente

Tabla 21. Comparación entre costos exergeticos (c_i) y termoeconomicos (π_i) para el esquema tecnologico con la optimización

Corriente	Original		Optimizado	
	c_i (U\$/GJ)	π_i (U\$/s)	c_i (U\$/GJ)	π_i (U\$/s)
MAKEUP	1.00	0,13	1.00	0.11
RECY+	4,51	0,42	3.98	0.35
ENTRAIN	4,13	0,40	4.11	0.36
AZEO+	1.00	0,14	1.00	0.11
ETOHCAR	10,86	0,13	9.87	0.12
FEED2	3,51	0,36	2.98	0.31
EGLICOL	4,58	0,43	3.15	0.38
WATER	0.00	0,11	0.00	0.09
QC	9,98	N/A	8.56	N/A
QR	4,43	N/A	4.21	N/A
QC'	8,22	N/A	7.58	N/A
QR'	4,43	N/A	4.01	N/A
QCOOLER	4,43	N/A	4.01	N/A

Fuente: Elaboración propia