

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Facultad de Ingeniería

“Utilización de un programa de simulación de procesos  
para reducir el consumo de vapor en un proceso de destilación”

Andrés David Chicol Rivera

Guatemala

2008



Utilización de un programa de simulación de procesos  
para reducir el consumo de vapor en un proceso de destilación

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Facultad de Ingeniería

Utilización de un programa de simulación de procesos  
para reducir el consumo de vapor en un proceso de destilación

Trabajo de investigación presentado por Andrés David Chicol Rivera para optar al grado  
académico de Licenciatura en Ingeniería Química

Guatemala

2008

Vo. Bo. Asesor:

(f)   
Ing. Maria Amalia Porta

Tribunal Examinador:

(f)   
Ing. Gamaliel Zambrano

(f)   
Ing. Maria Amalia Porta

(f)   
Ing. Carmen Ortiz

Fecha de Aprobación: Guatemala 4 de agosto de 2008

## PREFACIO

Este trabajo fue realizado gracias al apoyo brindado por el Centro Guatemalteco de Producción más Limpia (CGP+L), que en colaboración con el Centro Internacional para la Ciencia y Alta Tecnología (ICS por sus siglas en inglés) y la Organización de las Naciones Unidas para el Desarrollo Industrial (ONUDI), otorgaron la licencia para el uso del programa de simulación PRO II. El CGP+L realizó la gestión para aplicar esta herramienta de simulación en una destilería, que por razones de confidencialidad no autorizó revelar su nombre. Gracias a ICS, en Junio de 2007, se participó en el taller: “Beneficios económicos y técnicos obtenidos por la optimización de algunos procesos seleccionados por los Centros Nacionales de Producción más Limpia de Latinoamérica”. Esta experiencia fue de gran ayuda para el desarrollo de la simulación y para darle el enfoque apropiado a la optimización del proceso.

La simulación del proceso se hizo considerando las condiciones de operación reales de la planta, definiendo que la optimización estaría enfocada en la eficiencia energética del sistema por ser este uno de los insumos de mayor importancia económica en los costos del proceso. Los límites de esta simulación se establecieron para una de las líneas de producción de ron.

## CONTENIDO

	Página
PREFACIO	iv
LISTA DE CUADROS	vi
LISTA DE GRÁFICOS	vii
RESUMEN	viii
ABSTRACT	ix
Capítulos	
I. INTRODUCCIÓN	1
II. JUSTIFICACIÓN	2
III. OBJETIVOS	3
IV. ANTECEDENTES	4
V. METODOLOGÍA	9
VI. CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES	10
VII. DESARROLLO DE LA SIMULACIÓN	11
VIII. RESULTADOS	34
IX. DISCUSIÓN	35
X. CONCLUSIONES	38
XI. RECOMENDACIONES	39
XII. BIBLIOGRAFÍA	40
XIII. APÉNDICE	41

## LISTA DE CUADROS

<b>No.</b>	<b>Título</b>	<b>Página</b>
1	Materia prima en germinador y propagador	12
2	Definición de las sustancias del proceso	18
3	Propiedades corrientes de entrada	20
4	Resultados del caso base	27
5	Comparación de resultados	34
6	Porcentajes de mejora	34
7	Reducción de emisiones	34
8	Características de métodos termodinámicos	43

## LISTA DE ILUSTRACIONES

<b>No.</b>	<b>Título</b>	<b>Página</b>
1	Diagrama de flujo de la fermentación	13
2	Diagrama de flujo de la destilación	15
3	Unidades de medida	16
4	Diagrama de fermentación en PRO II	17
5	Diagrama de destilación en PRO II	17
6	Selección de componentes en PRO II	18
7	Selección del método termodinámico en PRO II	19
8	Definición de las corrientes de entrada	20
9	Perfil de presión en la columna de destilación	23
10	Entradas y salidas de la columna de destilación	24
11	Especificaciones y variables de la columna de destilación	25
12	Límites de convergencia	25
13	Especificaciones del "reboiler"	26
14	Especificaciones del condensador	26
15	Caso base ejecutado	27
16	Perfil de temperatura y fases en la columna de destilación	28
17	Variación del flujo molar y fracción molar de Etanol en relación al flujo de Melaza	29
18	Variación del flujo de Vino y de la fracción molar de Etanol en relación al flujo de Melaza	30
19	Flujo de entrada de melaza vs flujo de etanol	31
20	Variación de las fracciones de etanol en las salidas del fermentador en relación a la temperatura de fermentación	31
21	Diagrama de flujo del proceso mejorado	33

## RESUMEN

En este proyecto se utilizó el software de simulación PRO II para mejorar la eficiencia energética de un proceso de fabricación de etanol a partir de melaza de azúcar. Para conocerlo y poder simularlo se obtuvo la mayor cantidad de información posible del personal de la empresa. El proceso se divide en dos etapas: fermentación y destilación. Para realizar la simulación, se inició con la etapa de fermentación. Cuando se comprobó que los datos simulados coincidían con la realidad, se procedió a simular la etapa de destilación. Al unir ambas etapas, se formó el caso base.

Para la información generada a través de la simulación se llevaron a cabo dos análisis de sensibilidad. El primero evaluó la sensibilidad de la fracción de etanol en las corrientes de vino y de dióxido de carbono, al salir del fermentador, con base a variaciones de la temperatura de fermentación. En el segundo análisis se evaluó el efecto que tiene el flujo de entrada de melaza en la cantidad de vino que entra a la columna de destilación y en la cantidad de etanol producido. Con la información obtenida se realizaron los tres siguientes cambios en el proceso:

- Se fijó la temperatura de fermentación en 33 °C,
- Se colocó un equipo para recuperar parte del etanol perdido en forma gaseosa
- Se modificaron las especificaciones de operación de la columna de destilación.

Estos tres cambios se simularon conjuntamente. Con esto se redujo el flujo de vapor de 95.2 a 88.5 kg-mol/h y aumentó la concentración final de etanol de 90 a 94 °G.L.

La mejora de procesos es un ciclo continuo, por lo que se recomienda hacer evaluaciones constantes de los resultados obtenidos y verificar la efectividad de los controles establecidos. No hay que olvidar que la simulación de procesos no es más que una herramienta que tiene como propósito ayudar al ingeniero de procesos a tomar decisiones.

## ABSTRACT

In this project, the PRO II simulation suite was used to optimize the energy efficiency of an ethanol production process. In order to understand as well as possible the process, interviews were made directly to the plant personnel. The process is divided in two processes: fermentation and distillation. To run the simulation, first the fermentation process was simulated. The results of the fermentation were compared to those in the real plant and the data was verified. Then the distillation was simulated and then both simulations were put together to build the base case of the simulation.

The results were analyzed by doing two sensitivity analysis. First, the fraction of ethanol in the liquid and gas products of the fermentation was compared with the temperature in the fermentation. The second analysis consisted in evaluating the effect that the inlet molar flowrate of the molasses has in the final product. The following changes were made in the process:

- The fermentation temperature was set to be 33 °C,
- A flash was installed to recover the ethanol in the gas phase of the fermentation
- The distillation column operation specifications were modified

These three changes were simulated together in the new case. With these changes the vapor use was reduced from 95.2 to 88.5 kg-mol/h and the final ethanol concentration increased from 90 to 94 °G.L.

The improvement of processes is a continuous cycle, therefore it is recommended to always evaluate the results obtained and the effectiveness of the process practices. One must always remember that a process simulation is nothing more than a tool to help the process engineer make decisions.

# I. INTRODUCCIÓN

En Guatemala, la producción de roncs a partir de melaza es un proceso que ha adquirido gran importancia en los últimos años. La melaza es un subproducto del proceso de fabricación de azúcar a partir de la caña de azúcar. El proceso de producción de etanol a partir de melaza se puede dividir en dos operaciones principales, la fermentación y la destilación. Ambas etapas del proceso utilizan grandes cantidades de vapor como fuente energética.

El vapor es una fuente de calor muy importante en la industria. Éste se genera en el cuarto de calderas a partir de agua y algún combustible fósil. La quema de combustibles fósiles para la generación de vapor produce un impacto negativo en el ambiente por la cantidad de gases de invernadero que son liberados. Para el proceso de producción de etanol el vapor se utiliza en la destilación. En este caso, en particular el vapor, no tiene sustituto, es el medio de arrastre para separar el etanol del resto de componentes del vino que viene de la fermentación. A pesar que la generación de vapor tiene un importante impacto económico y ambiental, este trabajo se enfoca únicamente en la eficiencia energética del proceso.

En el mundo actual es importante hacer el mejor uso de las herramientas tecnológicas que están a nuestro alcance para mejorar los procesos de producción. La simulación de procesos es una herramienta que permite caracterizar el proceso, además de hacer cambios y analizar su influencia en el producto final sin hacer éstos cambios en el proceso actual. Usando el paquete de software PRO II para simular el proceso de producción de etanol desde la fermentación hasta la destilación se pueden hacer mejoras en el proceso para reducir el consumo de vapor.

## II. JUSTIFICACIÓN

Mejorar la eficiencia energética del sistema es, en otras palabras, mejorar el aprovechamiento del vapor. La reducción en el consumo de vapor tendría principalmente dos beneficios para la empresa. Cuando se reduce la cantidad de vapor que el proceso necesita, directamente disminuye la cantidad de combustible necesario para producir el vapor. De esta forma se reduce la contaminación ambiental debido a la emisión de gases de combustión. El ahorro de combustible también representa una reducción significativa en los costos de producción. La clave para obtener estos beneficios es identificar las etapas del proceso con mayor potencial de mejora. Sin embargo, para la empresa no es viable hacer cambios en el proceso y evaluar los resultados por un método de prueba y error. Además de ser muy caro, es un método arriesgado. Es por esto que la utilización de un programa de simulación de procesos es necesaria y de gran utilidad para la empresa. Con una simulación, se pueden cambiar temperaturas y presiones de operación, se puede modificar los flujos de las corrientes, se pueden instalar equipos, se pueden recircular corrientes, y hacer tantas iteraciones como el usuario lo desee. De esta forma, la simulación provee al ingeniero de procesos una herramienta con vastas posibilidades de cambio y mejora sin correr ningún riesgo de tener accidentes en la planta o desperdiciar lotes enteros de producción.

### III. OBJETIVOS

#### A. Generales

- Simular el proceso de fabricación de etanol a partir de melaza.
- Sugerir cambios en el proceso que mejoren la eficiencia energética

#### B. Específicos

- Simular la etapa de fermentación del proceso.
- Simular la etapa de destilación del proceso.
- Determinar las variables que tienen mayor influencia en el consumo de energético.
- Enumerar las etapas de la simulación de tal forma que se pueda utilizar como un caso de estudio para procesos similares.

## IV. ANTECEDENTES

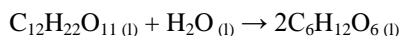
### A. Ron

Es la bebida con graduación alcohólica de 35% a 54% Vol. a 20 °C, obtenida de destilados alcohólicos simples o de la destilación de mostos fermentados de jugos de caña de azúcar, mieles, melaza o sus mezclas, de forma tal que se preserven los ingredientes aromáticos a los que el producto debe sus caracteres organolépticos específicos, añejados total o parcialmente. Para obtener el producto final se permite el uso de caramelo para la corrección de color y de carbón activado para decoloración. Se pueden agregar hasta 6g de azúcar por litro de ron. El coeficiente de congenéricos no podrá ser inferior a 40mg/100 ml de alcohol anhidrido ni superior a 500mg/100 ml de alcohol anhidro

El ron se puede clasificar en:

1. **Ron liviano:** si su coeficiente de congenéricos no supera los 200mg/100 ml de alcohol anhidro.
2. **Ron pesado:** si su coeficiente de congenéricos es superior a 200mg/100 ml de alcohol anhidro e inferior a 500mg/100 ml de alcohol anhidro.
3. **Ron añejo:** es el ron que ha sido añejado en su totalidad por un período mínimo de 2 (dos) años.

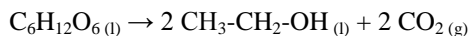
En Guatemala y otros países de Latinoamérica la melaza es una materia prima muy utilizada por ser un subproducto de la producción de azúcar. La melaza contiene una gran cantidad de carbohidratos en forma de azúcar fermentable. La forma más simple del azúcar es la glucosa,  $C_6H_{12}O_6$ , también conocida como dextrosa. La sacarosa es otro tipo de azúcar y es la que se encuentra en mayor proporción en la melaza, y se puede fermentar directamente o en sus componentes de glucosa y fructosa. Se debe notar que la fórmula de la sacarosa ( $C_{12}H_{22}O_{11}$ ) no es exactamente el doble de una glucosa o fructosa, ya que le hace falta una molécula de agua. Esto significa que al agregarle agua a la sacarosa, ésta se descompone en:



La degradación de una molécula al agregar agua se llama hidrólisis. Ésta adición de agua se debe considerar al hacer cálculos de la cantidad de azúcares simples (monosacáridos) producidas por disacáridos cuando se desea determinar el potencial de producción de alcohol por fermentación. Por ejemplo, la hidrólisis de 100 kg de sacarosa requiere 5.26 kg de agua y produce 105.26 kg de glucosa y fructosa. (López, 2006)

Basado en la ecuación de Gay-Lussac para producción de etanol a partir de la fermentación de glucosa, se deberían obtener 48.89 kg de dióxido de carbono ( $CO_2$ ) y 51.11 kg de etanol si se fermentan 100 kg de glucosa, (López, 2006). En la práctica la producción de etanol se reporta en litros, es decir que para producir 1 litro de etanol se necesitan 1.67 kg de azúcar o bien 2.98 kg de melaza (González, 2006). Ese es el máximo rendimiento teórico, sin embargo Pasteur concluyó que era prácticamente imposible alcanzar

más del 95% del rendimiento teórico ya que la reacción no es tan sencilla como lo explico Gay-Lussac (López, 2006). La reacción de Gay-Lussac para la producción de etanol es la siguiente:



En la industria azucarera australiana se reporta un rendimiento global del 87%, que es aceptable y asume que: la eficiencia de la destilación es del 99% y la de la fermentación es de 88%. Esto equivale a una producción global de 564 L de etanol por cada tonelada de azúcar fermentable, (Lavarack, 2003). La razón por la el rendimiento de etanol es menor en la fermentación que en la destilación es porque la fermentación de melaza con levadura produce otros componentes en pequeñas cantidades, tales como glicerol y algunos ácidos. Más detalles sobre las etapas de fermentación y destilación se explican posteriormente.

## B. Descripción del proceso

Todo el proceso inicia en los ingenios azucareros, que es dónde se obtiene la melaza o el jugo de caña. La melaza es el residuo que queda después que se extrae la azúcar cristalina del jugo de caña. Dependiendo de la cantidad de extracciones que haga el ingenio, existen melazas tipo A, B o C correspondientes a la primera, segunda o tercera extracción de azúcar cristalina. Cada evaporación hace que la melaza sea más viscosa, tenga menos azúcar y más impurezas. Generalmente la concentración de la melaza se mide en grados Brix. La escala Brix es una medida de la cantidad de azúcar en un líquido. Al medir la concentración de la melaza en esta escala se asume que todos los sólidos disueltos y suspendidos son azúcar. La melaza puede tener una concentración de hasta 80° Brix. Para que la levadura pueda efectuar una fermentación eficaz es necesario diluir la melaza a una concentración menor o igual a 25° Brix. Generalmente la melaza se diluye a esa concentración en la destilería. (López, 2006)

## C. Germinación y propagación

La germinación y propagación son la parte inicial del proceso. La calidad del producto final y la eficiencia del proceso dependen en gran parte de esta etapa. Un factor influyente en el proceso es la calidad de la levadura. La preparación de la levadura inicia en el laboratorio, y para esto se usa miel HTM (High Test Molasses), que es la miel de mejor calidad con una cantidad de azúcar total del 75%. Después que la levadura es cultivada en el laboratorio, ésta se lleva al propagador, que contiene la cantidad de nutrientes necesarios para ser inoculada. Durante la propagación se hace pasar aire constantemente a través del propagador para promover el crecimiento y reproducción de la levadura. Después de estar 9 horas en el propagador, la levadura se transporta a un germinador. La levadura permanece otras 9 horas en el germinador. Aquí también se mezcla con otros nutrientes para continuar el proceso de crecimiento y reproducción. Al salir del germinador la melaza posee una concentración de aproximadamente 14 °Brix.

## D. Fermentación

Una vez la levadura ha sido inoculada y la melaza tiene la concentración deseada, sigue el proceso de fermentación. La fermentación es una reacción anaerobia en la cual la levadura se alimenta de nutrientes para procesar el azúcar y producir principalmente alcohol. En esta fermentación las fuentes de nutrientes

son urea y fosfato dibásico de amonio. La fermentación dura aproximadamente 30 horas. Para determinar cuando la fermentación ha terminado se toman muestras periódicamente de la melaza en el fermentador y el principal parámetro que determina el nivel de avance de la reacción es el azúcar residual. Este parámetro representa la cantidad de azúcar que aún no ha reaccionado. Para que la fermentación esté terminada el azúcar residual debe ser menor que 1 g/L.

La fermentación tiene dos productos principales, alcohol y dióxido de carbono. El alcohol se conoce comúnmente como vino, que es una mezcla de alcoholes, agua y otros productos de la fermentación llamados congenéricos. Los congenéricos son: aldehídos, productos de la oxidación de alcohol; ácidos, productos de la oxidación de aldehídos; aceite de fusel, productos de la conversión de aminoácidos libres en agua a alcoholes superiores; ésteres, se producen por la esterificación de alcoholes y ácidos; compuestos volátiles sulfurosos, por la combinación de sulfatos y sulfuros con aminoácidos. Cada uno de estos componentes se mide como un coeficiente en relación al alcohol anhidro, expresados en mg/100 ml de alcohol anhidro. El ron, que es el producto deseado, se obtiene por destilación del vino. El segundo producto principal de la fermentación es el dióxido de carbono. Éste se extrae para ser procesado en otra planta. La fermentación es una reacción exotérmica, por lo que parte del alcohol se evapora junto con el dióxido de carbono (López, 2006). Si la temperatura no se controla y se eleva mucho, puede afectar el rendimiento de la fermentación. La temperatura ideal para que la levadura esté activa es de 33 a 35 °C. Una gran cantidad de agua se utiliza para mantener los fermentadores a menos de 36°C. Mantener la temperatura debajo de ese valor es difícil no solo porque la reacción produce calor, sino también porque la temperatura ambiente en la planta se mantiene alrededor de los 30°C.

## E. Destilación

La columna de destilación es una columna de 34 platos. El vino se bombea hacia la columna en el plato 12 para iniciar el proceso de destilación. La destilación es un proceso de separación que se logra debido a la diferencia entre los puntos de ebullición de los componentes de la mezcla. El etanol se obtiene a 78°C. En la parte inferior de la columna se inyecta vapor a baja presión. El vapor funciona como medio de arrastre para los gases alcohólicos. El vapor arrastra una mezcla de alcoholes y agua. El agua se condensa poco a poco conforme el vapor sube en la columna de destilación. Los platos son de tipo perforados, los cuales se usan especialmente cuando el mosto (fase líquida) posee sólidos en suspensión. Las perforaciones en los platos evitan que se acumulen los sólidos precipitados y tapen los platos. Para lograr la separación, el mosto y el vapor deben estar en equilibrio. Si la cantidad de vapor inyectado aumenta, también debe aumentar la cantidad de mosto inyectado.

Una vez separado el producto deseado en forma de vapor, debe recuperarse en forma líquida. Para esto los vapores alcohólicos son condensados al salir de la primera columna. Una parte del condensado se inyecta como reflujo para mantener la “riqueza alcohólica” en el último plato y así asegurar la calidad del producto. Uno de los aspectos más importantes de la destilación es el aprovechamiento de la energía en forma de calor. El vino que viene de la fermentación se hace pasar en uno de los condensadores de vapor

alcohólico para ayudar a condensar el vapor alcohólico y aprovechar el calor liberado para calentar el vino que es inyectado a la columna de destilación.

## F. Etapas de la simulación

Una simulación es una representación de aspectos del mundo real mediante números y símbolos que se pueden manipular para facilitar su estudio. Un simulador de procesos es una herramienta de ingeniería que permite realizar cálculos automatizados, balances de materia y/o energía, estimaciones de propiedades físicas y optimizar procesos. Vale la pena hacer énfasis en que un simulador de procesos es una herramienta, y debe ser utilizada como tal. Un simulador de procesos no tiene la capacidad de tomar decisiones, no tiene criterio. Esta es labor del ingeniero, utilizar la información disponible para obtener el mayor provecho y aplicarlo al proceso. Las etapas del proceso de simulación son las siguientes:

1. **Definición del problema:** definir el problema consiste en conocer el proceso que se desea simular. Para esto es necesario obtener la siguiente información:
  - a. **Compuestos del proceso:** todas las sustancias que participan en el proceso, sus concentraciones, flujos, propiedades físicas y químicas, y su estado físico.
  - b. **Operaciones unitarias:** estas son las principales etapas del proceso. Se necesita conocer las reacciones químicas que ocurren, y las especificaciones de la maquinaria que opera en cada operación.
  - c. **Diagramas de flujo:** estos diagramas son útiles para identificar las corrientes del proceso, entradas y salidas, puntos de generación de desechos, y flujo de materiales.
  - d. **Datos de equipos:** es importante conocer la capacidad y las especificaciones de los equipos utilizados para que la simulación sea real.
  - e. **Datos de operación:** es necesario conocer las temperaturas, presiones, flujos, y tiempos en cada operación unitaria.
2. **Desarrollar modelo del proceso** (para el paquete de software PRO II esto se divide en):
  - a. **Trazar diagrama de flujo:** para esta etapa el software tiene iconos predeterminados para representar los equipos principales y las corrientes se definen usando la herramienta “streams”.
  - b. **Definir componentes del proceso:** en el menú principal del PRO II ingresar a la opción “components” en el software y seleccionar todos los componentes que participen en el proceso. El software posee una base de datos de más de 1,700 compuestos, y también permite que el usuario defina algún compuesto, en caso éste no se encuentre en la base de datos.
  - c. **Seleccionar método termodinámico:** es necesario elegir un método termodinámico para que el software realice los cálculos necesarios para la simulación. Para esto se debe ingresar a la opción “Phase diagram” y elegir el método de una lista de métodos comunes, correlaciones generales, métodos de ecuaciones de estado y paquetes especiales. Para esta simulación se

eligió el método de NRTL (Non Random Two Liquid). Este método es adecuado para sistemas de equilibrio líquido-vapor para mezclas alcohólicas (Ver justificación de porque se trabajo con este método en el Apéndice II).

- d. Definir corrientes de alimentación: se deben definir los componentes, sus concentraciones, temperatura y presión de las entradas y salidas absolutas del proceso. En esta etapa se ignoran las corrientes que se generan durante el proceso y las corrientes de reflujo.
  - e. Definir operaciones unitarias: se debe ingresar al menú de propiedades en cada icono de las operaciones unitarias y definir la información que el software resalta con rojo, ésta es la información necesaria para la simulación.
  - f. Correr la simulación (generación de caso base): una vez ingresada la información necesaria y si ya no hay ningún campo marcado en rojo se puede ejecutar la simulación. Es recomendable ejecutar el programa varias veces para que las iteraciones sean aproximaciones confiables.
  - g. Revisar los resultados: ésta es una etapa muy importante. El software permite exportar los datos a Microsoft Excel para generar un reporte y revisar los resultados y algunas gráficas. Es necesario realizar ésta etapa para verificar que los resultados obtenidos concuerdan con la información real del proceso.
3. Obtener información adicional: una vez se haya realizado la simulación del caso base, es importante buscar más información de procesos similares, o incluso del mismo proceso, para poder tener la información necesaria para sugerir opciones de mejora.
  4. Análisis de sensibilidad: un análisis de sensibilidad es una herramienta del software PRO II que permite evaluar la incidencia de una variable del proceso en otra. Por ejemplo, se puede analizar cómo es afectada la concentración de etanol en la corriente de entrada a la torre de destilación si cambia la temperatura de fermentación. De igual forma se puede evaluar cualquier parámetro en alguna etapa del proceso y determinar cuanto afecta en la producción del producto final.
  5. Optimizar el proceso: con información adicional del sistema y con un buen análisis de sensibilidad se pueden generar opciones de mejora para el proceso. Una mejora de proceso puede ser desde recircular una corriente hasta implementar una nueva tecnología, o un equipo nuevo en el proceso.
  6. Realizar la simulación final: la simulación final es el resultado de las mejoras sugeridas al proceso. El propósito de ésta es mostrar los cambios obtenidos en el proceso y así proveer información valiosa para que el ingeniero de proceso pueda tomar decisiones bien fundamentadas. (Fermeglia, 2007)

## V. METODOLOGÍA

La obtención de datos relacionados con el proceso de producción, tanto para la etapa de fermentación como para la destilación, se realizó a través de visitas a la planta y realizando entrevistas a los ingenieros de procesos y a operarios. También se revisaron los registros de producción para obtener los datos útiles para el desarrollo de balances de materia. Para las especificaciones del producto, se consultaron los parámetros establecidos por el departamento de control de calidad de la empresa. Las propiedades físicas y químicas necesarias para la simulación se obtuvieron de fuentes bibliográficas como el *Manual del Ingeniero Químico*, libros de termodinámica y de química orgánica. Otra fuente de información valiosa fue la del caso de simulación de la destilería Paraíso de Cuba, que aunque no presentaba las mismas condiciones de operación, equipo y especificaciones de producto, tenía características comunes con el caso analizado en este proyecto. El contacto con el ingeniero cubano que desarrolló esta simulación se logró gracias al apoyo del Centro Guatemalteco de Producción más Limpia. Además se contó con el apoyo de ingenieros especializados en el paquete de software PRO II®. Con los cuales se mantuvo constante comunicación, vía electrónica, durante el desarrollo de la simulación.

Una vez recopilada la información necesaria, se simuló el caso base. El caso base representa la situación actual del proceso. Se hicieron análisis de sensibilidad para determinar las variables que tienen mayor incidencia en la calidad del producto final y en la demanda de consumo energético. A partir de los resultados de estos análisis se pudo modificar algunas variables críticas del proceso y generar una nueva simulación, un caso mejorado.

## VI. CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES

Actividad	Enero	Febrero	Marzo	Abril	Mayo	Junio	Julio	Agosto
Visitas a destilería	■	■	■	■	■	■	■	■
Análisis de información obtenida			■	■				
Investigación de casos similares			■	■				
Determinación de información faltante			■	■				
Obtención de información faltante				■	■			
Simulación de caso base				■	■			
Simulación de posibles mejoras				■	■	■		
Elaboración y revisión de tesis					■	■	■	■
Presentación final de tesis								■

## VII. DESARROLLO DE LA SIMULACIÓN

Realizar la simulación de un proceso químico va más allá de la representación de un proceso mediante un software. Una simulación es una herramienta para la mejora de procesos, por lo tanto, se debe percibir no solo como un proceso con inicio y fin determinados, sino como un ciclo de mejora continua. A continuación se describen los pasos seguidos para realizar la simulación de un proceso de producción de etanol a partir de melaza de caña. Las etapas descritas a continuación corresponden al procedimiento que se utilizó para este proyecto utilizando la herramienta PROII, y son una propuesta de los pasos que se pueden seguir para hacer una simulación; sin embargo, estas pueden variar según el proceso que se esté simulando, el enfoque del proyecto y la herramienta de simulación que se esté utilizando.

### A. Definición del problema:

Para definir el problema a solucionar, se debe conocer el proceso a simular. Para poder conocer el proceso de fabricación de etanol a partir de melaza de caña se realizaron visitas a la planta de producción y se buscó información en diferentes fuentes literarias.

La melaza o jugo de caña es la materia prima principal de este proceso. La melaza es el residuo que queda después que se extrae el azúcar cristalina del jugo de caña. Dependiendo de la cantidad de extracciones que haga el ingenio, existen melazas tipo A, B o C correspondientes a la primera, segunda o tercera extracción de azúcar cristalina. Cada evaporación hace que la melaza sea más viscosa, tenga menos azúcar y más impurezas. Generalmente la concentración de la melaza se mide en grados Brix. La escala Brix es una medida de la cantidad de azúcar en un líquido. Al medir la concentración de la melaza en esta escala se asume que todos los sólidos disueltos y suspendidos son azúcar. La melaza puede tener una concentración de hasta 80° Brix. Para que la levadura pueda efectuar una fermentación eficaz es necesario diluir la melaza a una concentración menor o igual a 25° Brix. Generalmente la melaza se diluye a esa concentración en la destilería. (López, 2006) En este proceso la melaza tenía una concentración inicial que variaba entre 80 y 85 °Brix.

1. **Germinación y propagación.** La germinación y propagación son la parte inicial del proceso. La calidad del producto final y la eficiencia del proceso dependen en gran parte de estas etapas. Un factor influyente en el proceso es la calidad de la levadura. La preparación de la levadura inicia en el laboratorio, y para esto se usa miel HTM (High Test Molasses), que es la miel de mejor calidad con una cantidad de azúcar total del 75%, y una insignificante cantidad de impurezas. Después que la levadura es cultivada en el laboratorio, ésta se lleva al germinador, que contiene la cantidad de nutrientes necesarios para ser inoculada. En este proceso los nutrientes utilizados son tiamina, sulfato de amonio, fosfato de amonio y cloruro de potasio. Durante la germinación se hace pasar aire constantemente a través del germinador para promover el crecimiento y reproducción de la levadura. Después de estar 9 horas en el germinador, la levadura se transporta a un propagador. El propagador es un reactor como el germinador, pero de mayor tamaño y donde la cantidad de nutrientes agregada es mayor. La levadura permanece otras 9 horas en el

propagador. Aquí también se mezcla con otros nutrientes para continuar el proceso de crecimiento y reproducción. Al salir del propagador la melaza posee una concentración de aproximadamente 14 °Brix.

Cuadro 1. Materias primas utilizadas en germinador y propagador.

<b>Materia Prima</b>
Levadura
Melaza
Tiamina
Sulfato de amonio
Fosfato de amonio
Cloruro de potasio
Sulfato de magnesio

Las cantidades específicas utilizadas para el germinador y propagador no pueden ser publicadas por ser datos confidenciales de la empresa. Para ingresar estos datos al software PRO II se realizaron las conversiones correspondientes para el Sistema Internacional de unidades y se ingresaron como flujos (kg/h), para tomar en cuenta el tiempo que transcurre en cada operación.

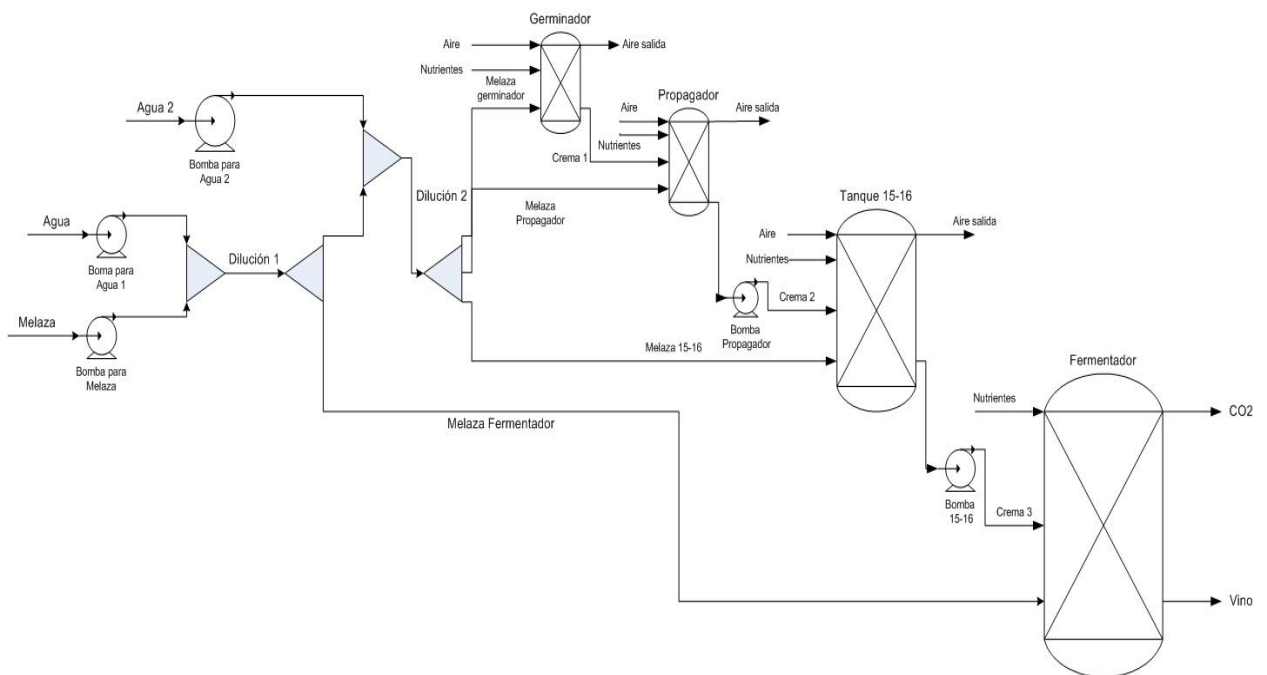
2. **Fermentación.** Una vez la levadura ha sido inoculada y la melaza tiene la concentración deseada, sigue el proceso de fermentación. La fermentación es una reacción anaerobia en la cual la levadura se alimenta de nutrientes para procesar el azúcar y producir principalmente alcohol. En esta fermentación las fuentes de nutrientes son urea y fosfato dibásico de amonio. La fermentación dura aproximadamente 30 horas. Para determinar cuando la fermentación ha terminado se toman muestras periódicamente de la melaza en el fermentador y el principal parámetro que determina el nivel de avance de la reacción es el azúcar residual. Este parámetro representa la cantidad de azúcar que aún no ha reaccionado. Para que la fermentación esté terminada el azúcar residual debe ser menor que 1 g/L.

La fermentación tiene dos productos principales, alcohol y dióxido de carbono. El alcohol se conoce comúnmente como vino, que es una mezcla de alcoholes, agua y otros productos de la fermentación llamados congenéricos. Los congenéricos son: aldehídos, productos de la oxidación de alcohol; ácidos, productos de la oxidación de aldehídos; aceite de fusel, productos de la conversión de aminoácidos libres en agua a alcoholes superiores; ésteres, se producen por la esterificación de alcoholes y ácidos; compuestos volátiles sulfurados, por la combinación de sulfatos y sulfuros con aminoácidos. Cada uno de estos componentes se mide como un coeficiente en relación al alcohol anhidro, expresados en mg/100 ml de alcohol anhidro. El etanol, que es el producto deseado, se obtiene por destilación del vino. El segundo producto principal de la fermentación es el dióxido de carbono. Éste se extrae para ser procesado en otra

planta. La fermentación es una reacción exotérmica, por lo que parte del alcohol se evapora junto con el dióxido de carbono (López, 2006). Si la temperatura no se controla y se eleva mucho, puede afectar el rendimiento de la fermentación. La temperatura ideal para que la levadura esté activa es de 33 a 35 °C. Para mantener la temperatura de los fermentadores a menos de 36 °C se utiliza agua. Mantener la temperatura debajo de ese valor es difícil no solo porque la reacción produce calor, sino también porque la temperatura ambiente en la planta se mantiene alrededor de los 30°C.

La planta cuenta con tres germinadores, tres propagadores, 6 pre-fermentadores (tanques 15-16) y más de 10 fermentadores. En la simulación cada etapa del proceso, sin importar la cantidad de equipos, se representa por un solo equipo, así como se puede observar en el siguiente diagrama:

Ilustración 1. Diagrama de flujo de la fermentación.



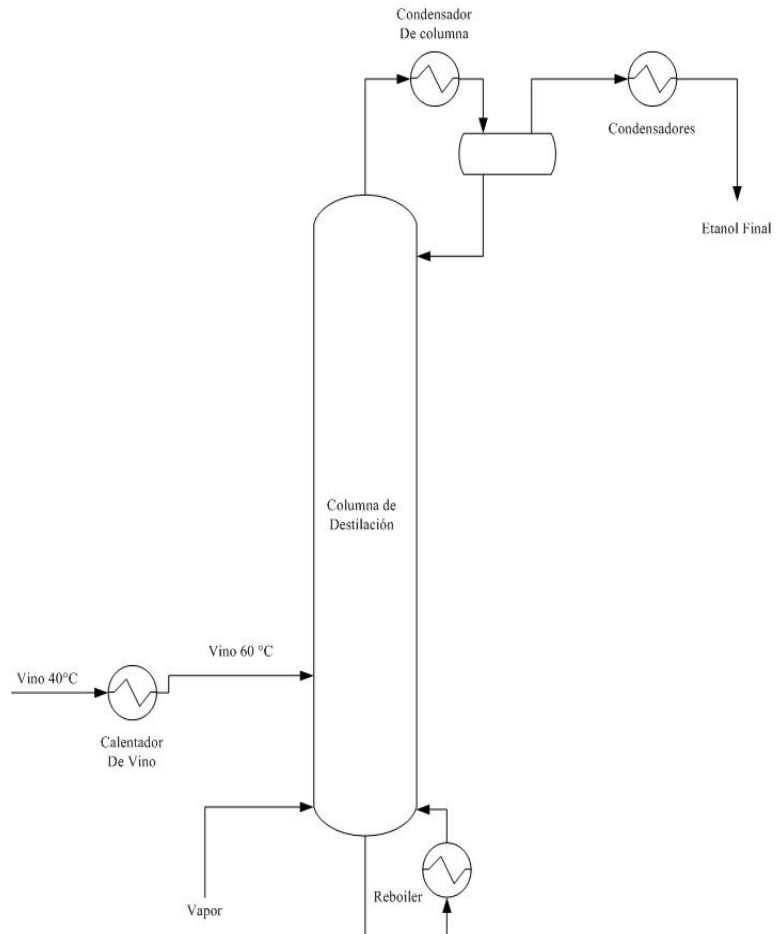
3. **Destilación.** La columna de destilación es una columna de 34 platos. El vino se bombea hacia la columna en el plato 12 para iniciar el proceso de destilación. La destilación es un proceso de separación que se logra debido a la diferencia entre los puntos de ebullición de los componentes de la mezcla. El etanol se obtiene a 78°C. En la parte inferior de la columna se inyecta vapor a baja presión (presión atmosférica). El vapor funciona como medio de arrastre para los gases alcohólicos. El vapor arrastra una mezcla de alcoholes y agua. El agua se condensa poco a poco conforme el vapor sube en la columna de destilación. Los platos son de tipo perforados, los cuales se usan especialmente cuando el mosto (fase líquida) posee sólidos en suspensión. Las perforaciones en los platos evitan que se acumulen los sólidos precipitados y tapen los platos. Para lograr la separación, el mosto y el vapor deben estar en equilibrio. Si la

cantidad de vapor inyectado aumenta, también debe aumentar la cantidad de mosto inyectado para mantener el equilibrio de la operación.

Una vez separado el producto deseado en forma de vapor, debe de recuperarse en forma líquida. Para esto los vapores alcohólicos son condensados al salir de la primera columna. Una parte del condensado se inyecta como reflujo para mantener la “riqueza alcohólica” en el último plato y así asegurar la calidad del producto. El vino que viene de la fermentación se hace pasar en uno de los condensadores de vapor alcohólico para ayudar a condensar el vapor alcohólico y aprovechar el calor liberado para calentar el vino que es inyectado a la columna de destilación.

En la planta la condensación se logra por una serie de condensadores colocados en serie. Por razones de simplificación, el efecto total en la temperatura se representa aquí por un solo condensador, como se muestra en la siguiente ilustración:

Ilustración 2. Diagrama de flujo de la destilación.



## B. Desarrollar modelo del proceso.


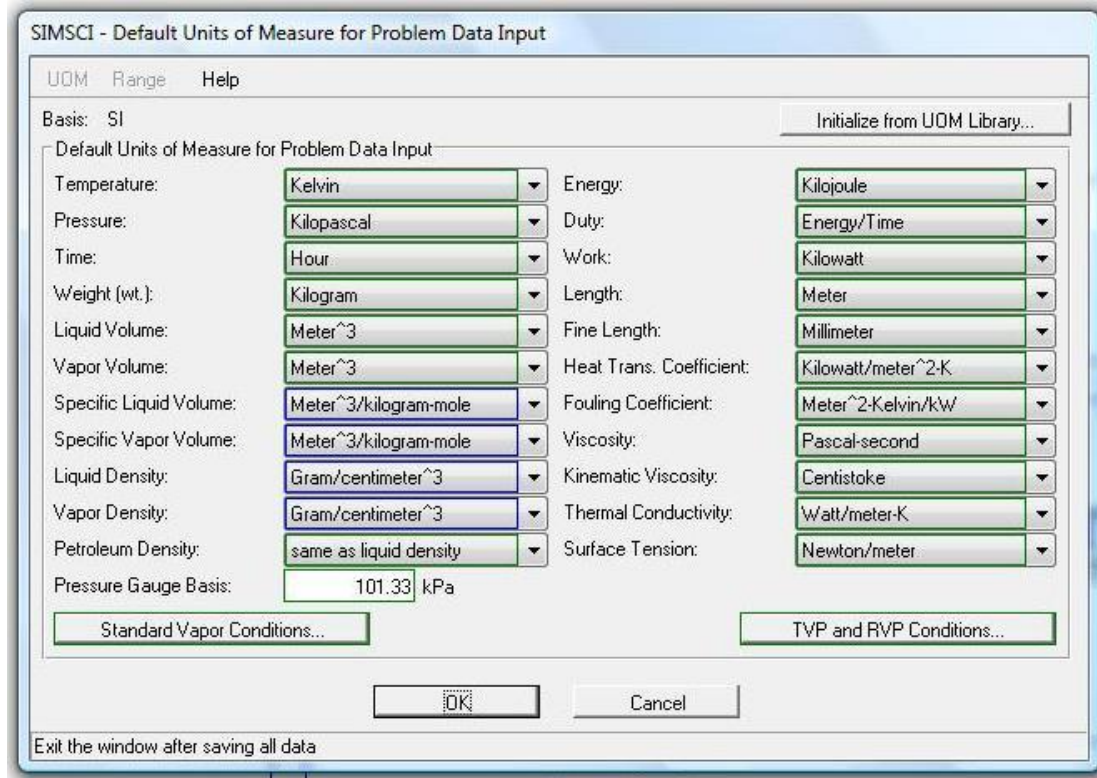
Para el paquete de software PRO II se deben seguir 7 pasos. Antes de iniciar es importante definir el sistema de unidades con el que se va a trabajar. En este caso se trabajó todo con el Sistema Internacional (SI) de unidades. Para seleccionar el sistema de unidades se debe ingresar al icono , desplegándose la siguiente ventana:

Ilustración 3. Selección de las unidades de medida.



1. Trazar diagrama de flujo. Para esta etapa el software tiene íconos predeterminados para representar los equipos principales y las corrientes se definen usando la herramienta “streams”. Como se mencionó anteriormente, el proceso de fabricación de etanol a partir de melaza de caña se puede dividir en dos etapas principales: la fermentación y la destilación. Además, la simulación se trabajó de la siguiente forma: primero se simuló la fermentación y al comprobar que los resultados eran correctos, se simuló la destilación. Para realizar los diagramas de flujo se debe primero seleccionar los equipos que participan en el proceso y después se incluyen las corrientes. Los diagramas realizados en cada caso son los siguientes:

Ilustración 4. Diagrama de fermentación en el PRO II.

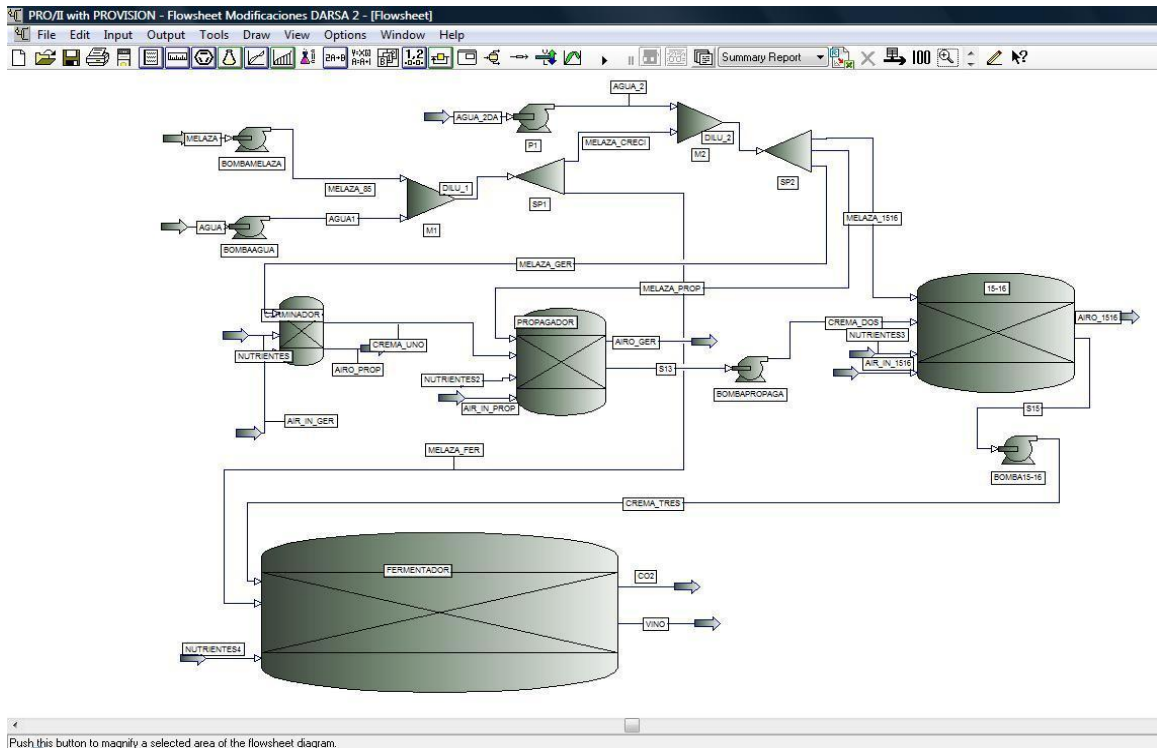
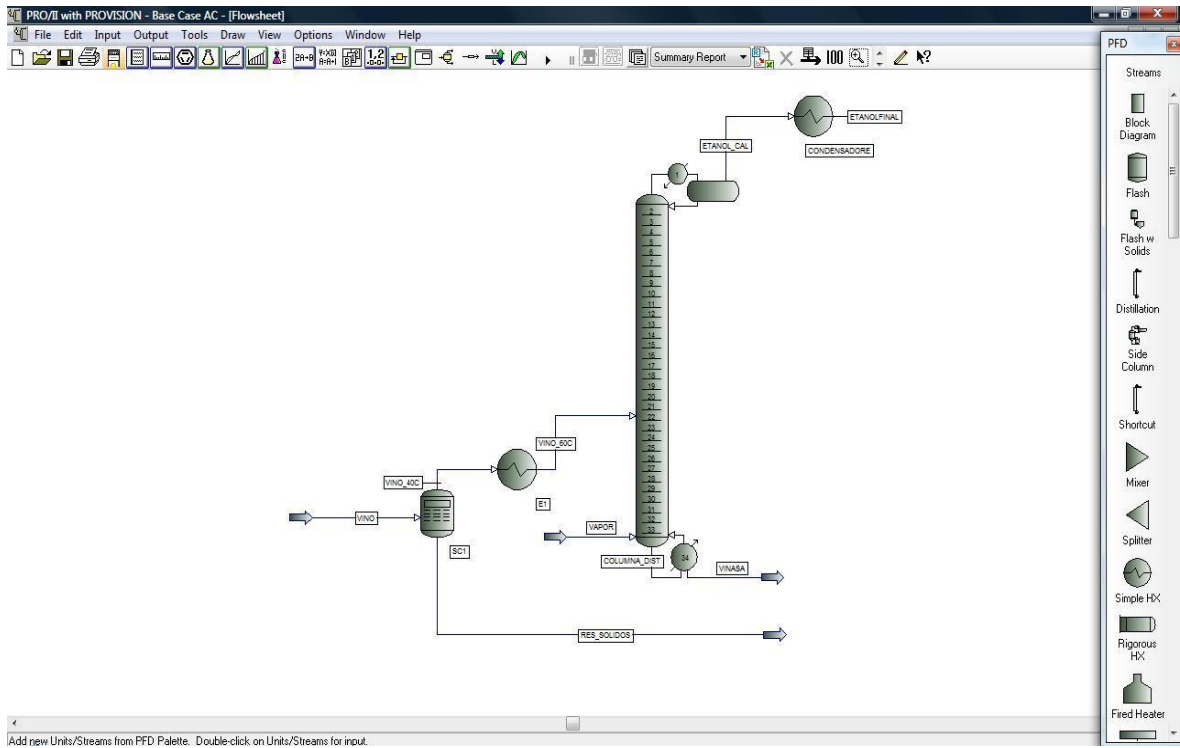


Ilustración 5. Diagrama de destilación en el PRO II.



En estos diagramas los equipos aparecen de color gris porque la simulación no ha sido ejecutada.


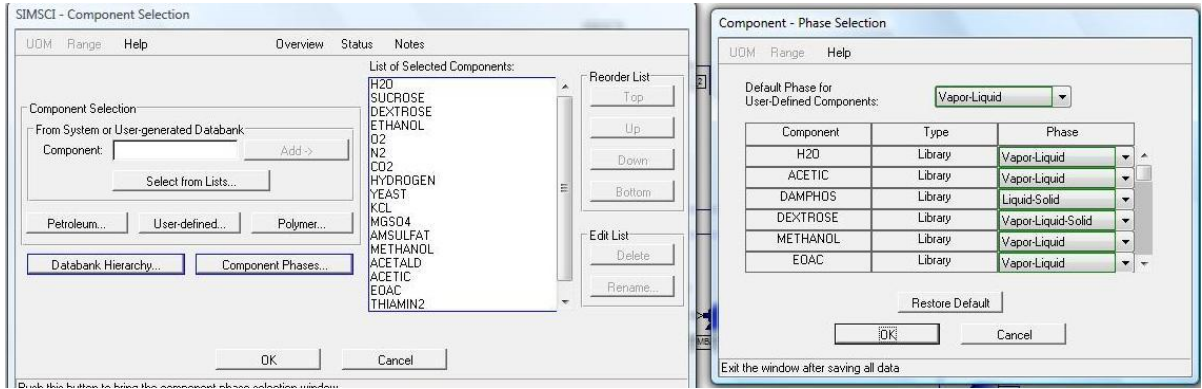
2. Definir componentes del proceso. El software posee una base de datos de más de 1,700 compuestos, y también permite que el usuario defina algún compuesto, en caso éste no se encuentre en la base de datos. Para ingresar los compuestos en el PRO II se debe ingresar a la opción “Selección de Componentes”, identificada por el siguiente ícono: . Lo que despliega el siguiente cuadro:

Ilustración 6. Selección de componentes en PRO II.



En este proceso se definieron los siguientes componentes (en paréntesis el nombre como aparece en el software):

Cuadro 2. Definición de las sustancias del proceso

No.	Sustancia	Nombre en PRO II	Estado	Fuente
1	Agua	H2O	Vapor-líquido	Biblioteca
2	Sacarosa	SUCROSE	Vapor-líquido	Biblioteca
3	Dextrosa	DEXTROSE	Vapor-líquido-sólido	Biblioteca
4	Etanol	ETHANOL	Vapor-líquido	Biblioteca
5	Oxígeno	O2	Vapor-líquido	Biblioteca
6	Nitrógeno	N2	Vapor-líquido	Biblioteca
7	Hidrógeno	HYDROGEN	Vapor-líquido	Biblioteca
8	Dióxido de carbono	CO2	Vapor-líquido	Biblioteca
9	Levadura	YEAST	Líquido-sólido	Usuario
10	Cloruro de potasio	KCL	Líquido-sólido	Biblioteca
11	Sulfato de magnesio	MGSO4	Líquido-sólido	Biblioteca
12	Sulfato de amonio	AMSULFAT	Líquido-sólido	Biblioteca
13	Metanol	Methanol	Vapor-líquido	Biblioteca
14	Acetaldehído	ACETALD	Vapor-líquido	Biblioteca
15	Ácido acético	ACETIC	Vapor-líquido	Biblioteca
16	Acetato de etilo	EOAC	Vapor-líquido	Biblioteca
17	Tiamina	THIAMIN2	Líquido-sólido	Usuario
18	Fosfato de di-amonio	DAMPHOS	Líquido-sólido	Biblioteca

La base de datos del paquete PRO II® ya cuenta con la información físico-química de los compuestos. Sin embargo se deben revisar contra las referencias bibliográficas, como el Manual de Ingenieros Químicos, para verificar que no haya errores en las bases de datos que puedan afectar la simulación. En algunos casos se debe agregar información que no está en la base de datos y que son vitales para el proceso de simulación.


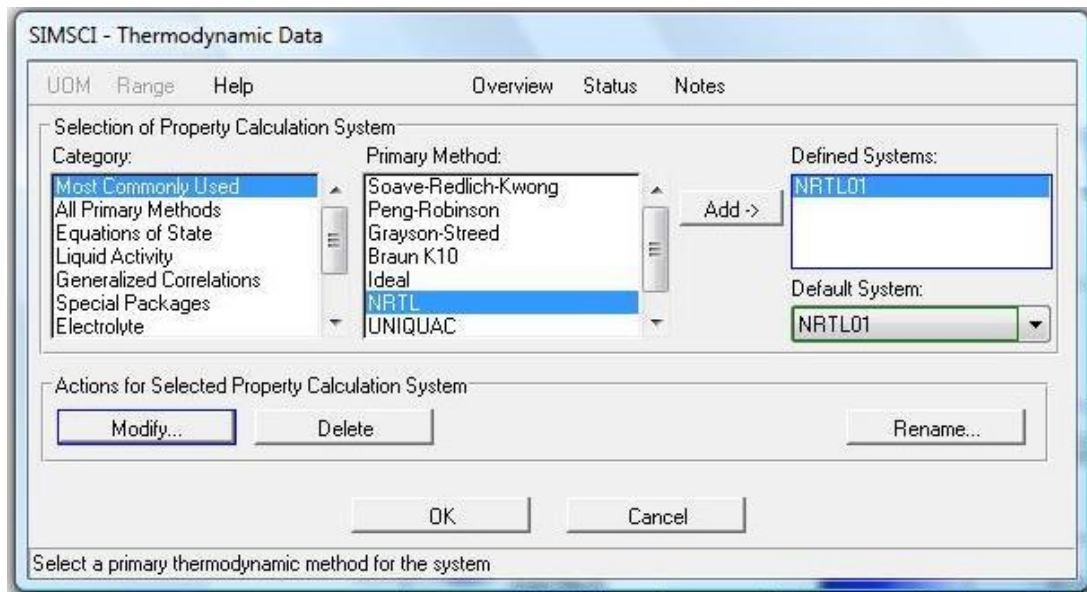
3. **Seleccionar método termodinámico.** Es necesario elegir un método termodinámico para que el software realice los cálculos necesarios para la simulación. Para esto se debe ingresar a la opción “Thermodynamic Data” seleccionando el ícono , el cual despliega el siguiente menú:

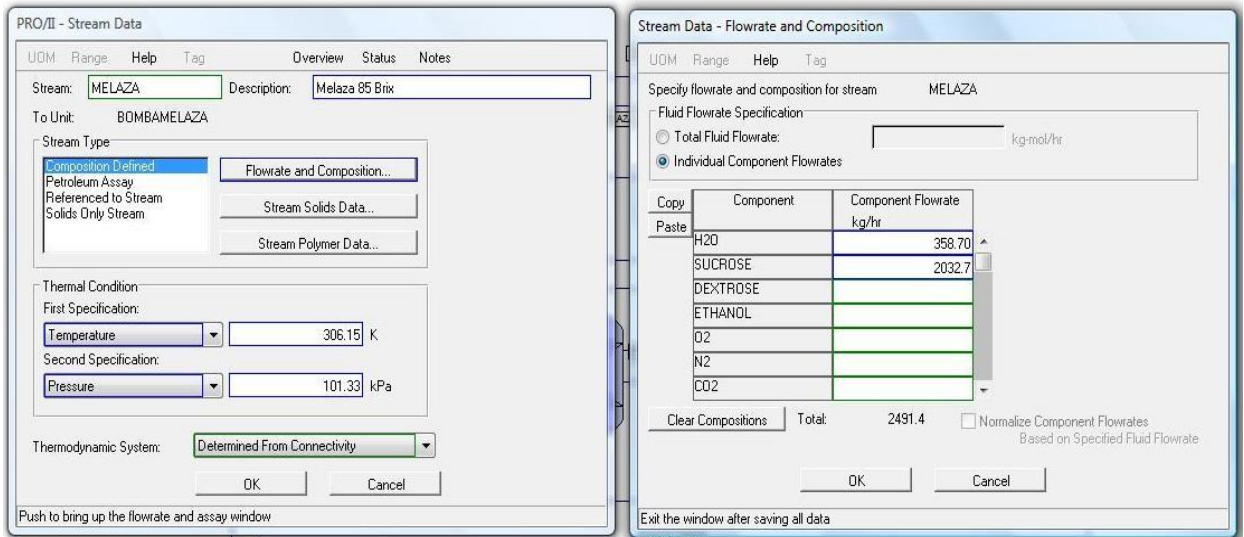
Ilustración 7. Selección del método termodinámico en PRO II.



Se debe elegir el método de una lista de métodos comunes, correlaciones generales, métodos de ecuaciones de estado y paquetes especiales. Para esta simulación se eligió el método de NRTL. Este método es adecuado para sistemas de equilibrio líquido-vapor para mezclas alcohólicas (Ver Apéndice II). (Ghanadzadeh, 2005)

4. **Definir corrientes de alimentación.** Se deben definir los componentes, sus concentraciones, temperatura y presión de las entradas del proceso. Se toman en cuenta únicamente las entradas porque las características de las otras corrientes son calculadas por el software según el equipo de donde salgan y según el método termodinámico elegido.

Ilustración 8. Definición de las corrientes de entrada.



La imagen anterior muestra dos cuadros. El de la izquierda es el cuadro principal para definir una corriente. Después se debe seleccionar la casilla “Flowrate and Composition” y aparece el cuadro de la derecha. El segundo cuadro muestra una lista de todos los componentes del proceso, entonces se debe ingresar el flujo molar individual de los componentes de la corriente o se puede definir el flujo total y las fracciones de los componentes presentes. Las corrientes de entrada que fue necesario definir son las siguientes:

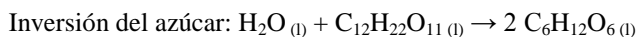
Cuadro 3. Propiedades de las corrientes de entrada

Corriente	Descripción	T (K)	P (kPA)	Flujo (s) (kg-mol/h)			
Agua	Entrada de agua a primera dilución	301.15	101.33	337.39			
Agua 2da	Entrada de agua a segunda dilución	306.15	101.33	52.11			
Air In_Ger	Aire de entrada al Germinador	306.15	101.33	3.13 O <sub>2</sub>	11.79 N <sub>2</sub>		
AirIn_Prop	Aire de entrada al Propagador	306.15	101.33	3.13 O <sub>2</sub>	11.79 N <sub>2</sub>		
AirIn15-16	Aire de entrada al tanque 15-16	306.15	101.33	3.13 O <sub>2</sub>	11.79 N <sub>2</sub>		
Melaza	Entrada de melaza a 85 °Brix	306.15	101.33	19.91 H <sub>2</sub> O	5.94 Sucrosa		1.67 Á. Acético
Nutrientes	Nutrientes para el Germinador	301.15	101.33	5.22E <sup>-4</sup> KCl	7.67E <sup>-4</sup> (NH <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	3.66E <sup>-6</sup> Tiamina	7.67E <sup>-4</sup> (NH <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> HPO <sub>4</sub>
Nutrientes2	Nutrientes para el Propagador	301.15	101.33	5.96E <sup>-3</sup> KCl	1.53E <sup>-2</sup> (NH <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	3.66E <sup>-5</sup> Tiamina	3.83E <sup>-3</sup> (NH <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> HPO <sub>4</sub>
Nutrientes3	Nutrientes para el tanque 15-16	301.15	101.33	2.15E <sup>-2</sup> KCl	2.76E <sup>-2</sup> (NH <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	1.33E <sup>-4</sup> Tiamina	6.91E <sup>-3</sup> (NH <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> HPO <sub>4</sub>
Nutrientes4	Nutrientes para el Fermentador	301.15	101.33	4.60E <sup>-3</sup> (NH <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> HPO <sub>4</sub>			

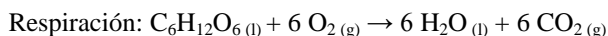
5. Definir operaciones unitarias. Estas son las principales etapas del proceso. En cada operación unitaria ocurre un cambio en el producto, el cambio puede ser químico, físico o ambos. Se necesita conocer las reacciones químicas que ocurren y definir las en el orden en que ocurren en cada operación unitaria. También se deben conocer las especificaciones de operación de cada equipo. Las operaciones unitarias del proceso de fabricación de etanol a partir de melaza utilizadas en la simulación son: mezclado, germinación de levadura, propagación, fermentación, destilación, separación física (flash), e intercambio de calor. Al colocar el ícono de cada operación en el diagrama de flujo, éste automáticamente aparece con el contorno rojo. Se debe acceder al cuadro de propiedades de cada equipo y definir la información que el software resalta con rojo, lo que indica que ésta es la información requerida para la simulación. Además se pueden cambiar otras especificaciones según la información disponible, pero esto es diferente en cada operación unitaria.

a. Mezclado: la operación de mezclado es utilizada para diluir la corriente de melaza mezclándola con agua. En el PRO II esto se logra con un “mixer”. En la planta la melaza y el agua son bombeados a un tanque donde se mezclan para alcanzar la concentración deseada y posteriormente esta mezcla se bombea al proceso. En el simulador se mezclan las corrientes de agua y melaza en las proporciones adecuadas para obtener la concentración de cada dilución de la melaza. La primera dilución alcanza una concentración entre 35 y 45 °Brix. La segunda dilución alcanza una concentración entre 19 y 28 °Brix. En la planta estos valores son muy variables, pero para ejecutar la simulación se usaron los valores promedio de concentración.

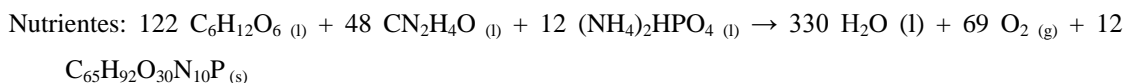
b. Germinación y propagación: estas dos operaciones unitarias son iguales, a excepción que las concentraciones de los componentes son diferentes y el tamaño de la operación. El propósito de la germinación y la propagación es que la levadura crezca para prepararla para la fermentación. Las reacciones químicas que ocurren en esta etapa son las siguientes:



La sacarosa es la principal forma de azúcar en la melaza. La hidrólisis de la sacarosa produce glucosa, que posteriormente será fermentada. La conversión de la sacarosa en esta reacción es del 100%.

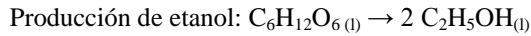


La respiración es una reacción que ocurre para producir energía en forma de ATP (Adenosín trifosfato) para desarrollar las funciones metabólicas de la levadura. En esta reacción 38 moles de ATP son formados por cada mol de glucosa. La conversión de la glucosa es del 15.7%. (López, 2006)



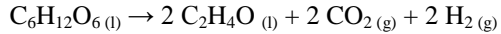
Esta reacción define la formación de la biomasa para la fermentación.

c. Fermentación: la fermentación es un proceso anaerobio en donde el metabolismo de la levadura produce etanol a partir de glucosa. Además de la reacción de producción de etanol, ocurren otras reacciones secundarias. Las reacciones que ocurren son las siguientes:



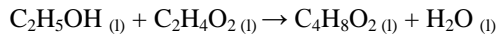
La conversión de glucosa en la fermentación es del 63%.

Otra parte de la glucosa produce acetaldehído:



La conversión de glucosa en esta reacción es del 0.5%

Después el acetaldehído producido reacciona con el etanol y produce etil acetato:



La conversión en esta reacción en base al acetaldehído es del 2.5%

Debido a que la fermentación es un proceso exotérmico, en el software se asumió un aumento de temperatura de 10°C para representar de mejor forma lo que ocurre en la planta.

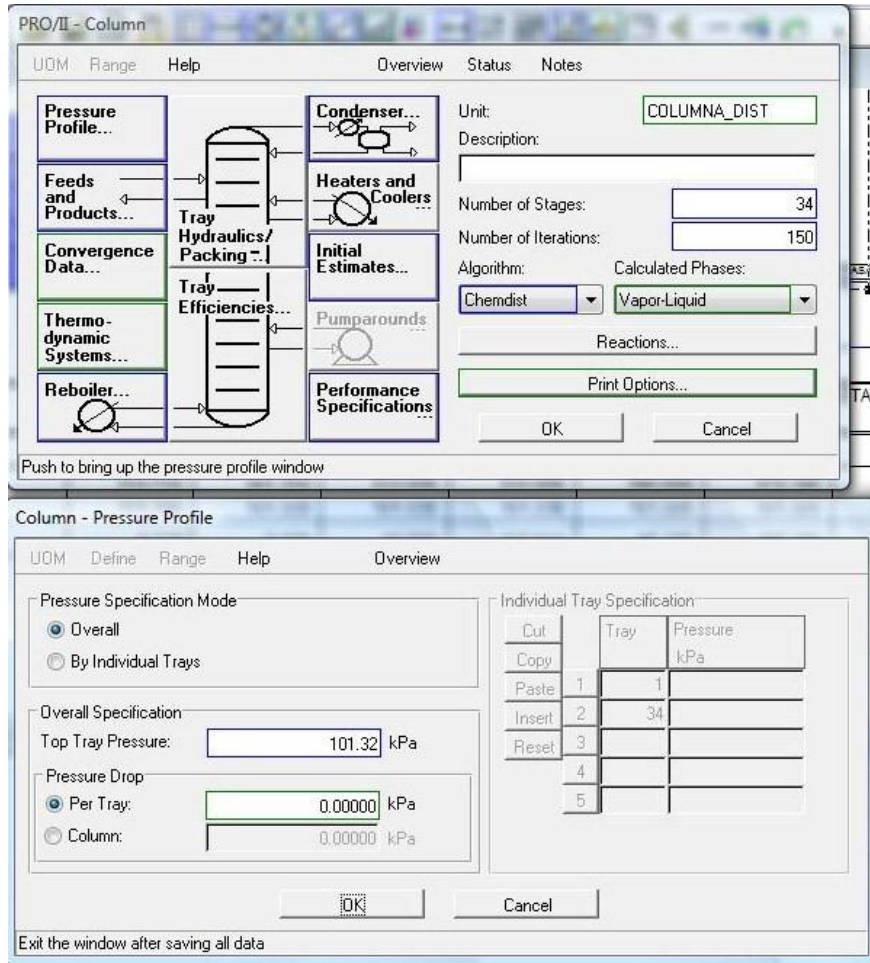
El proceso de fermentación dura aproximadamente 33 horas. Al finalizar la forma del fermentador permite la extracción de los residuos sólidos por la parte inferior del tanque y el vino sale con un contenido insignificante de sólidos. En el simulador, del fermentador salen únicamente dos corrientes: la gaseosa y la líquida. Para no causar problemas en la torre de destilación se agregó un “Stream Calculator” para separar los residuos sólidos del vino que entra a la torre de destilación.

d. Intercambio de calor: el intercambio de calor es una operación unitaria usada para calentar o enfriar fluidos. En el simulador un intercambiador se puede definir de varias formas. Lo elemental es definir una corriente de entrada y otra de salida del intercambiador. Para definir la transferencia de calor se puede agregar la corriente de entrada y salida con el fluido que se realiza el intercambio, sino se puede especificar el cambio de temperatura que ocurre en el intercambiador.

e. Destilación. La destilación es sin duda una de las partes más importantes de este proceso. Es aquí donde ocurre la separación de componentes para obtener el producto deseado, etanol. En la planta existen varias líneas de destilación, según el producto que se desea obtener. La columna de obtención de etanol es una de las más pequeñas físicamente. Es una columna de 34 platos, según los operadores de la planta. El vino entra en el plato número 12 y el etanol se obtiene en la parte superior de la columna en donde hay un reflujo que permite concentrar la corriente de salida para obtener una alta concentración (mayor a 90 °G.L.) de etanol.

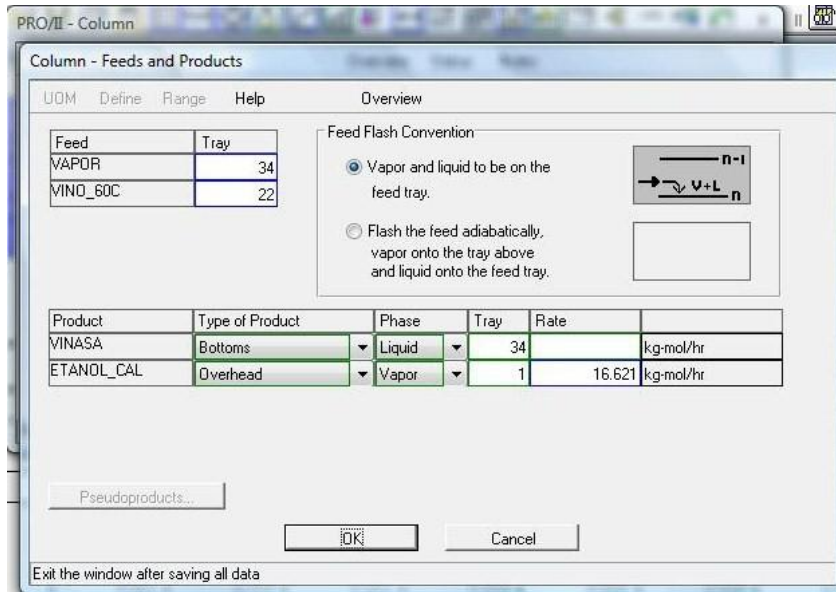
Para simular la columna de destilación, el condensador y el “reboiler” se ingresaron las siguientes especificaciones en el software:

Ilustración 9. Perfil de la presión en la columna de destilación.



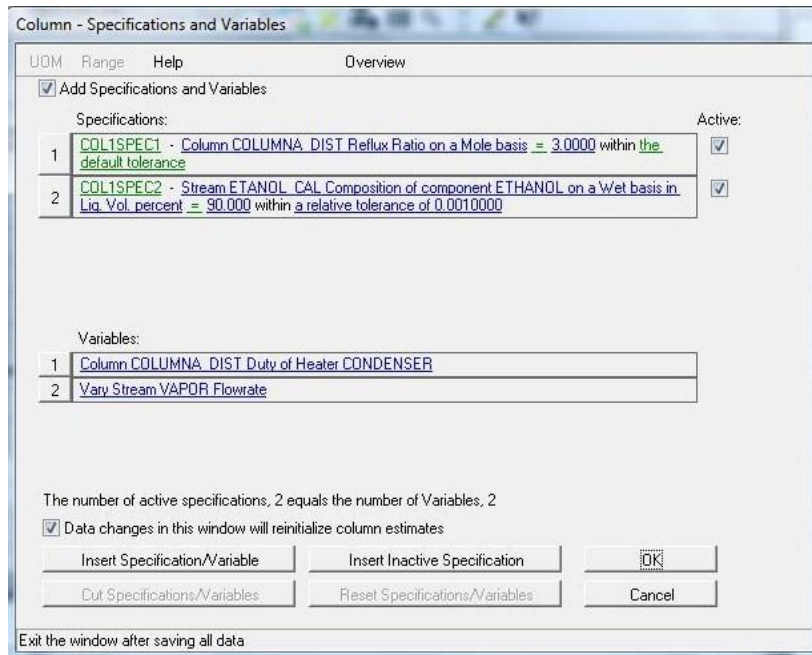
La parte superior de esta imagen muestra el menú principal para definir las condiciones de trabajo de la columna de destilación. Se debe ingresar el número de etapas de la destilación (34) y la cantidad de iteraciones para realizar los cálculos. En este caso se definieron 150 iteraciones como número máximo, este número debe ser lo suficientemente grande para asegurar que el software pueda realizar los cálculos necesarios hasta que los resultados estén dentro de los límites de tolerancia establecidos (ver Ilustración 12). Al seleccionar el cuadro de la esquina superior izquierda, "Pressure Profile", aparece el cuadro en la parte inferior de la ilustración; donde se definió la presión del plato superior igual a la presión atmosférica y la pérdida de presión como cero. Se hizo de esta forma debido a que no fue posible obtener mayor información al respecto. Para definir el perfil de presión de ésta forma se tomó como referencia la simulación del ejemplo cubano.

Ilustración 10. Entradas y salidas de la columna de destilación.



En la planta el vino ingresa a la columna en la plato número 12, que equivale al plato número 22 si se cuenta el plato superior como el número 1 y el inferior como el número 34. La cantidad de etanol que se obtiene en el plato superior (16.621 kg-mol/h) se obtuvo después de ejecutar la simulación varias veces. Para el simulador es necesario ingresar el flujo de la alimentación o de la corriente del producto para poder realizar el balance. Se decidió ingresar el valor del producto para asegurar que se obtiene la mayor cantidad de éste según las actuales del proceso.

Ilustración 11. Especificaciones y variables de la columna de destilación.

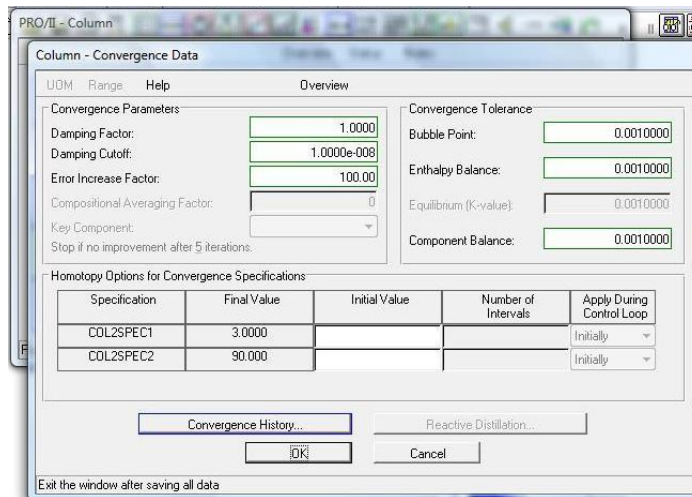


Para que la columna de destilación produzca los resultados esperados se definieron dos especificaciones de operación:

- 1) La razón de reflujo en base molar igual a 3.0
- 2) La concentración en porcentaje líquido de volumen de etanol en la salida igual a 90%.

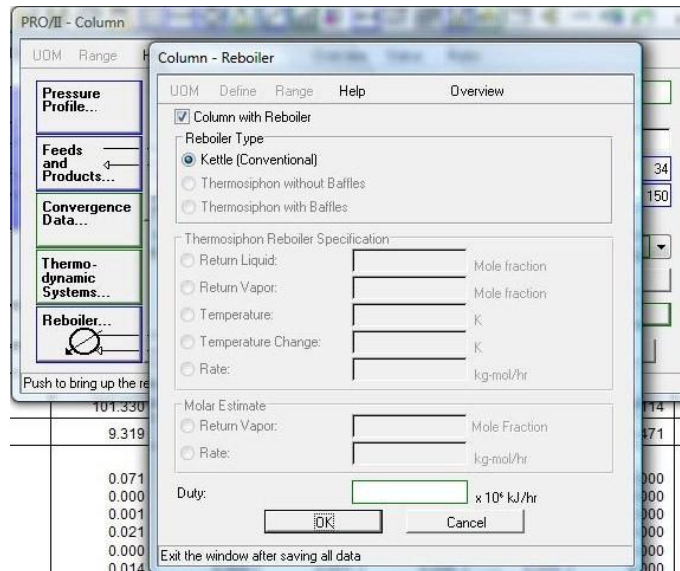
Para obtener estos dos resultados el software puede variar los valores del trabajo realizado por el condensador en la parte superior de la columna y el flujo de vapor que entra a la torre.

Ilustración 12. Límites de convergencia



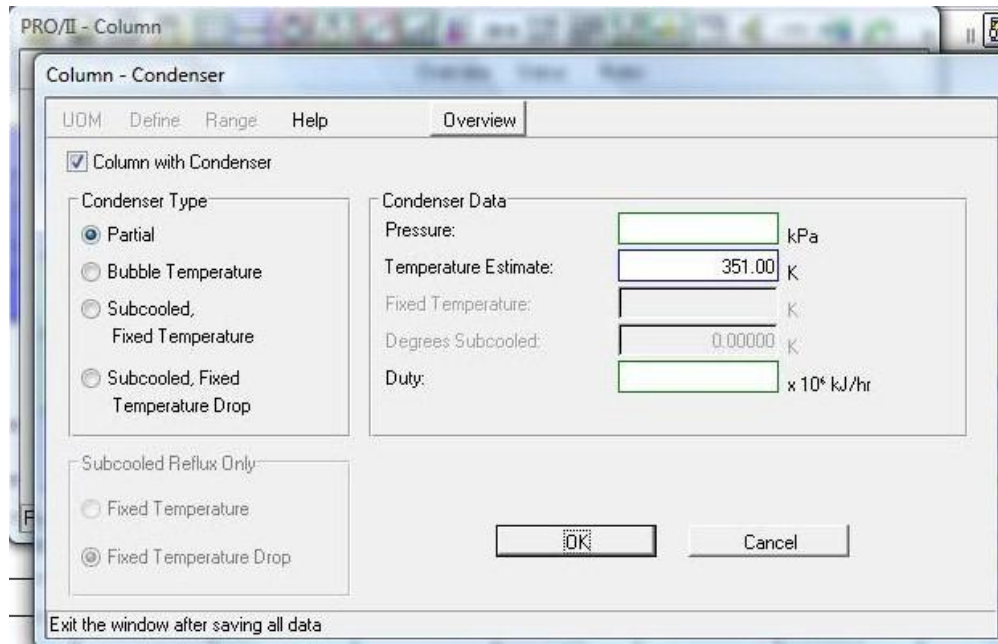
Estos límites definen la diferencia que puede existir entre cada iteración para indicarle al software que los resultados son consistentes. En esta tabla no se alteraron los valores establecidos por el software.

Imagen 13. Especificaciones del “reboiler”



Para el reboiler de la columna no se modificaron las especificaciones de operación indicadas en el software por default. El trabajo (duty) realizado por el reboiler es una variable que puede ser calculada por el software según sea necesario.

Ilustración 14. Especificaciones del condensador.



Para definir el condensador es necesario ingresar por lo menos una de tres características: presión, temperatura o trabajo del condensador. Se eligió definir la temperatura de operación porque se conoce la temperatura a la cual se obtiene el etanol, 78 °C (351 K).


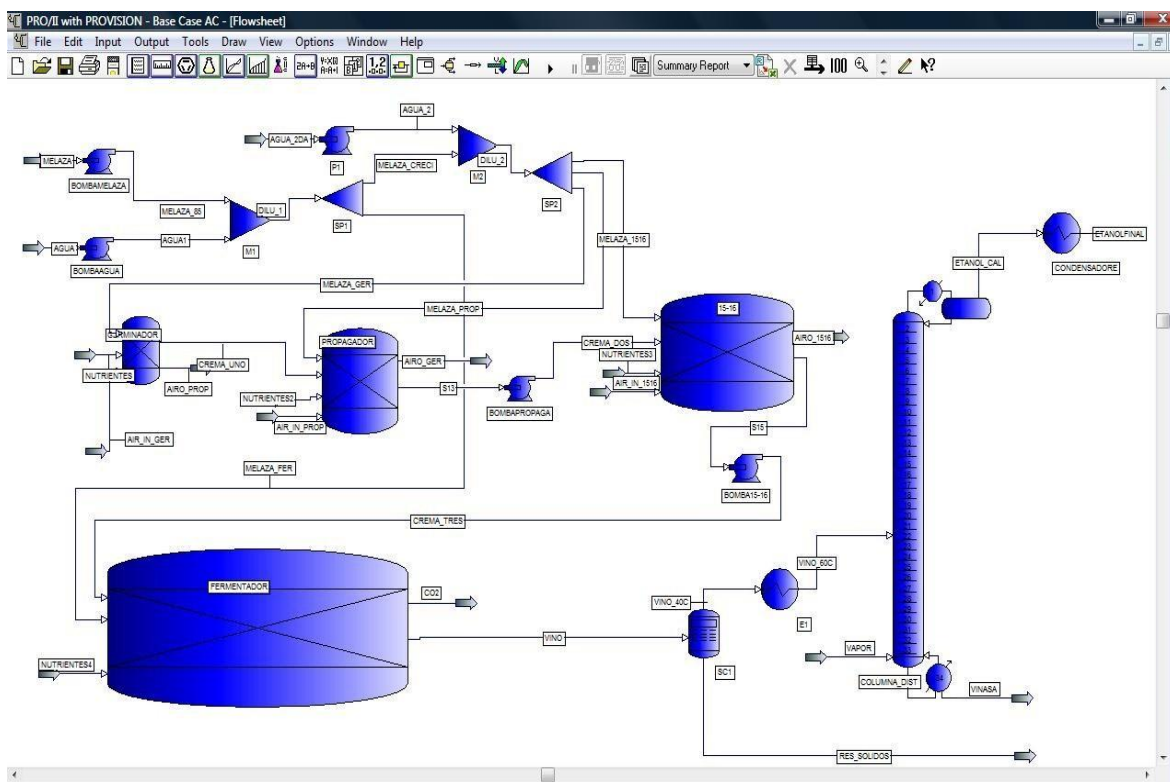
6. Ejecutar la simulación (generación de caso base). Una vez ingresada la información necesaria y requerida por el software se puede ejecutar la simulación. Esto se confirma cuando ya no existen campos marcados en rojo. Es recomendable ejecutar el programa varias veces para que las iteraciones sean aproximaciones confiables. Para ejecutar la simulación se debe presionar el botón de “run” . Cuando la simulación se ha ejecutado correctamente todas las unidades cambian a color azul, como se muestra en la siguiente ilustración:

Ilustración 15. Caso base ejecutado.



7. Revisar los resultados. Esta es una etapa muy importante. El software permite exportar los datos a Microsoft Excel para generar un reporte y revisar los resultados. Es necesario realizar ésta etapa para verificar que los resultados obtenidos concuerdan con la información real del proceso. La tabla obtenida contiene información de la temperatura, la presión, el flujo y los componentes de cada corriente del proceso. A continuación se muestran los resultados de las corrientes principales, la tabla completa se muestra en la sección de anexos.

Cuadro 4. Resultados de la ejecución del caso base.

Nombre de la corriente	CO2	ETANOL FINAL	MELAZA	RES SOLIDOS	VAPOR	VINASA	VINO_60C
Descripción	Flujo de CO2	Salida de producto final	Melaza 85 Brix	Residuos sólidos del vino	Ingreso de vapor a la columna	Salida de vinasa de la columna	Vino que entra a la columna
Fase	Vapor	Líquida	Líquida	Mezcla	Vapor	Líquida	Líquida
Temperatura (K)	313.7317	300.0000	306.1500	313.0000	397.0000	373.1417	333.0000
Presión (kPa)	101.3299	101.3250	101.3300	101.3299	222.9150	101.3250	101.3299
Flujo (kg-mol/h)	9.3186	16.6200	27.5146	10.6924	95.1816	496.1023	417.5407

Continuación Cuadro 4.

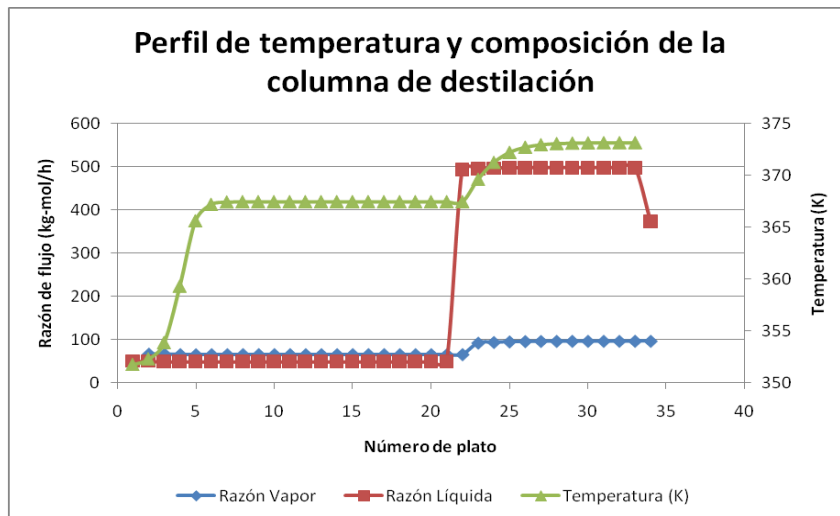
Composición (fracción molar)

	CO2	ETANOL FINAL	MELAZA	RES SOLIDOS	VAPOR	VINASA	VINO_60C
H2O	0.0715	0.2633	0.7237	0.0000	1.0000	1.0000	0.9707
SUCROSE	0.0000	0.0000	0.2158	0.0585	0.0000	0.0000	0.0000
DEXTROSE	0.0006	0.0000	0.0000	0.3406	0.0000	0.0000	0.0000
ETHANOL	0.0211	0.7367	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0293
O2	0.0002	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
N2	0.0137	0.0000	0.0000	0.0006	0.0000	0.0000	0.0000
CO2	0.8878	0.0000	0.0000	0.4347	0.0000	0.0000	0.0000
HYDROGEN	0.0034	0.0000	0.0000	0.0005	0.0000	0.0000	0.0000
YEAST	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
KCL	0.0000	0.0000	0.0000	0.0026	0.0000	0.0000	0.0000
MGSO4	0.0000	0.0000	0.0000	0.0006	0.0000	0.0000	0.0000
AMSULFAT	0.0000	0.0000	0.0000	0.0041	0.0000	0.0000	0.0000
METHANOL	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
ACETALD	0.0005	0.0000	0.0000	0.0030	0.0000	0.0000	0.0000
ACETIC	0.0005	0.0000	0.0605	0.1502	0.0000	0.0000	0.0000
EOAC	0.0008	0.0000	0.0000	0.0032	0.0000	0.0000	0.0000
THIAMIN2	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
DAMPHOS	0.0000	0.0000	0.0000	0.0015	0.0000	0.0000	0.0000

Estos resultados son muy parecidos a los obtenidos realmente en la planta. Por razones de confidencialidad no se pueden publicar los datos reales, pero los simulados son una aproximación bastante confiable.

Otra herramienta importante del software es la presentación de los resultados. Como usuario es posible obtener casi cualquier dato, y gráfica, relacionado con el proceso, sus componentes, etc. Para la torre de destilación se generó el siguiente perfil de flujo de la fase de vapor y la fase líquida en la columna de destilación y la temperatura de cada plato:

Ilustración 16. Perfil de temperatura y fases en la columna de destilación



Para la correcta interpretación de la figura anterior hay que recordar que el plato 34 es el inferior y el plato 1 es el superior. Esta gráfica muestra el aumento de la cantidad de líquido del plato 22 al 34 a partir del momento que ingresa el vino a la torre. También se observa el gradiente de temperatura en la columna, con un valor aproximado de 373 K en la parte inferior de la columna que disminuye hasta alcanzar 351 K, la temperatura a la cual se extrae el etanol.

### C. Obtener información adicional:

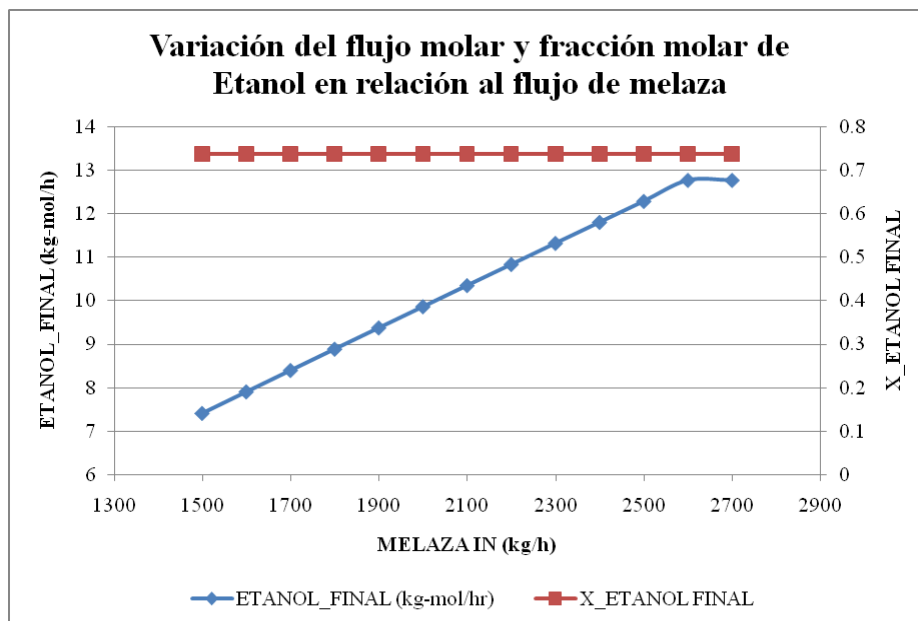
Una vez se haya realizado la simulación del caso base, es importante buscar más información de procesos similares, o incluso del mismo proceso, para verificar la veracidad de los resultados. Como los resultados en esta simulación fueron los esperados según la información obtenida en las visitas realizadas a la planta de producción, ya no fue necesario investigar información adicional para generar el caso base.

### D. Análisis de sensibilidad:

El análisis de sensibilidad es otra herramienta del software PRO II que permite evaluar la incidencia de una variable del proceso en otra. La importancia de hacer análisis de sensibilidad es que son útiles para evaluar proyectos y proveen información necesaria para tomar decisiones. Permite conocer como las diferentes variables del proceso (flujos, temperaturas, presiones) pueden afectar el rendimiento final, así como cuales son las variables que tienen mayor influencia sobre este.

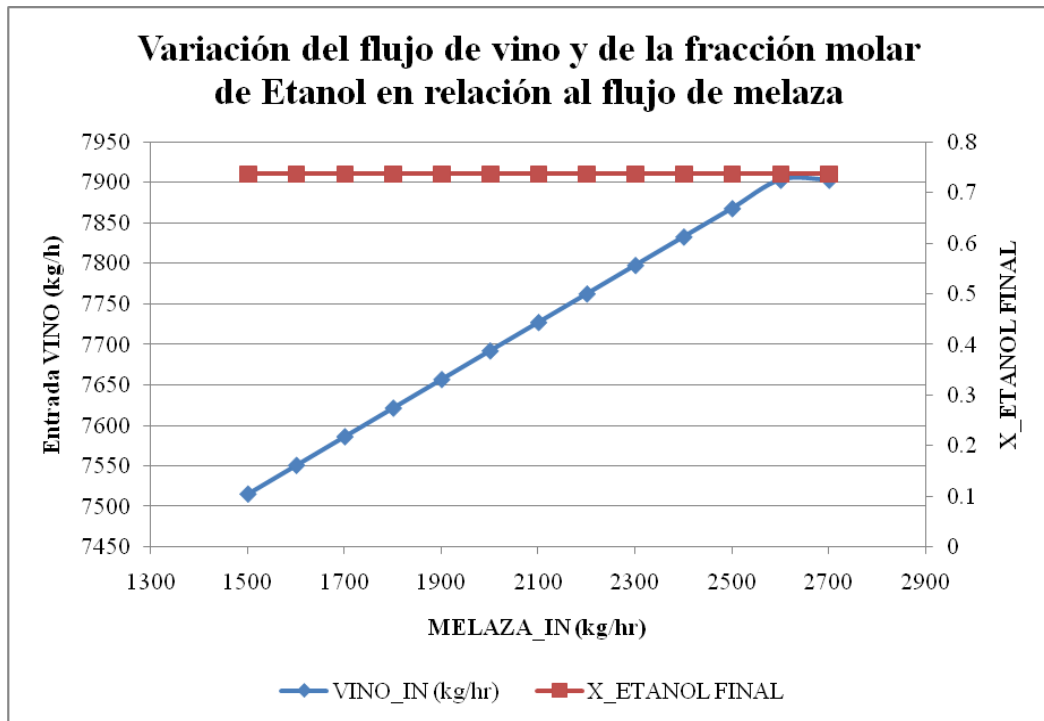
El primer análisis de sensibilidad realizado compara la cantidad de etanol producido versus cantidad de melaza que ingresa al proceso.

Ilustración 17. Variación del flujo molar y fracción molar de Etanol en relación al flujo de melaza



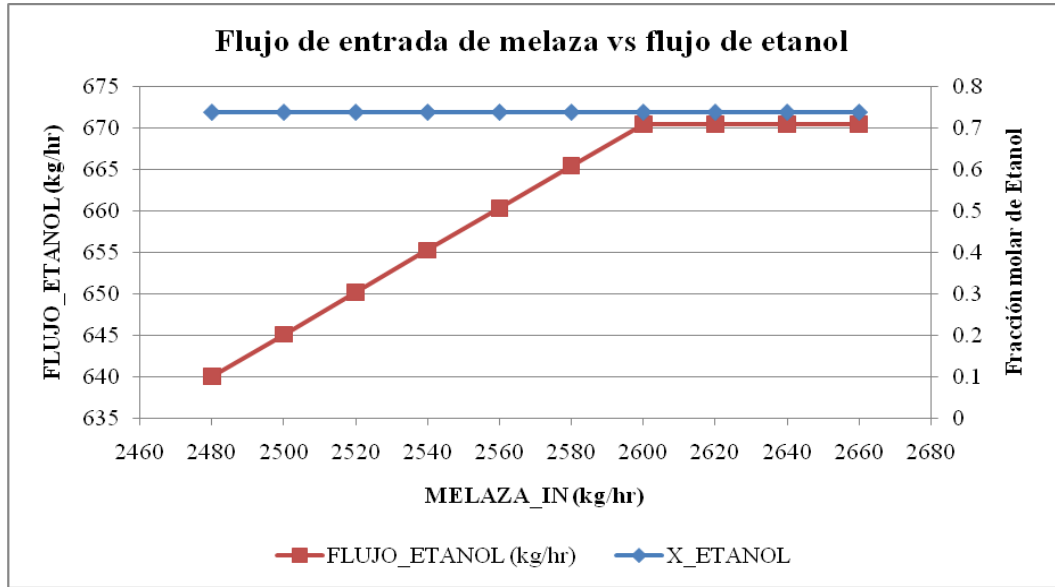
En esta gráfica se observa que la cantidad de etanol producido es proporcional a la cantidad de melaza que ingresa al proceso. Sin embargo esta tendencia llega a un límite, a partir de 2500 kg melaza/h la cantidad de etanol que se obtiene es constante. Algo que también es importante notar es que la concentración del etanol no depende de la cantidad de melaza que entre al sistema. El producto sale con una fracción molar de etanol de 0.737, que equivale a una concentración de 90° G.L. Esta concentración es producto de la concentración del etanol en el vino que entra a la columna, de la cantidad de platos (etapas) de la columna, del factor de reflujo en la parte superior de la columna, de las condiciones de entrada del vapor a la columna, y de la temperatura de entrada del vino, entre otros. La siguiente gráfica muestra que la concentración final del etanol no depende del flujo de entrada del vino, sino únicamente de la concentración del etanol.

Ilustración 18. Variación del flujo de vino y de la fracción molar de Etanol en relación al flujo de melaza



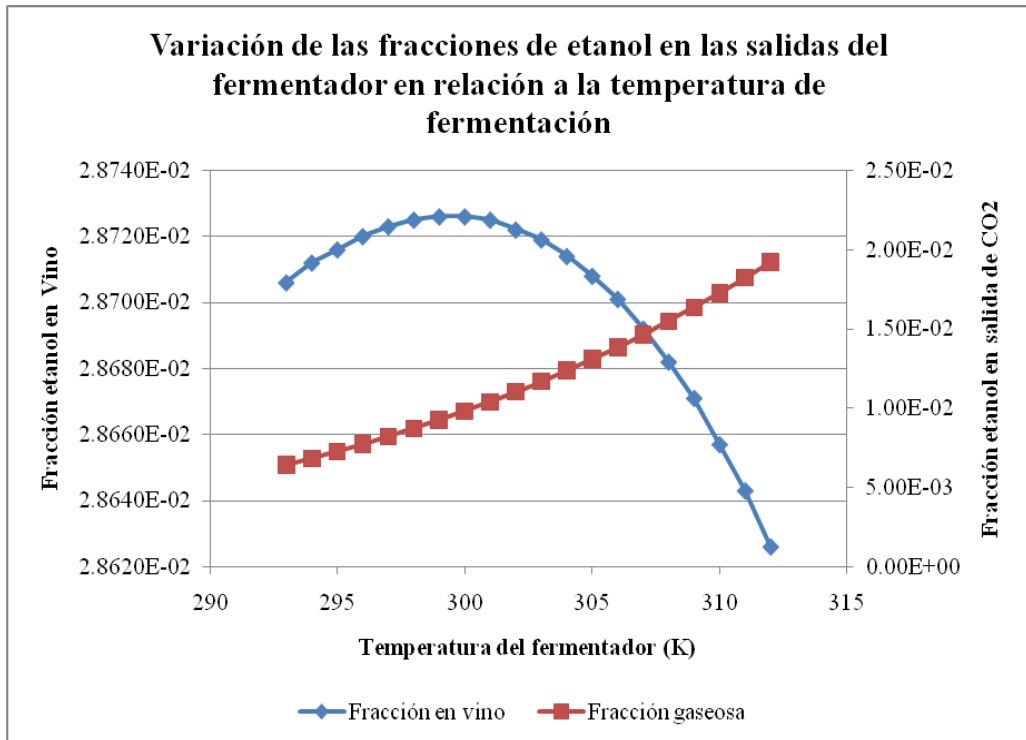
Para poder determinar el flujo de melaza ideal para maximizar la producción de etanol se realizó un análisis de sensibilidad variando el flujo de melaza de 2480 a 2660 kg/h. El diagrama se presenta a continuación:

Ilustración 19. Flujo de entrada de melaza vs flujo de etanol final.



Dado que la concentración de etanol en el vino es un factor influyente en la concentración final de etanol, vale la pena analizar de que forma se puede optimizar la concentración de etanol en la salida del fermentador.

Ilustración 20. Variación de las fracciones de etanol en las salidas del fermentador en relación a la temperatura de fermentación



Para obtener una buena representación gráfica de los resultados, se graficaron ambas concentraciones en ejes diferentes. Visualmente se observa una fuerte relación entre la temperatura de la fermentación y la concentración de etanol. Sin embargo, la variación de concentración es mínima, solo se observa un cambio en la quinta o sexta cifra decimal. A pesar que los cambios son infinitesimales, la influencia en el producto final es significativa debido a los grandes volúmenes de producción.

## E. Optimizar el proceso:

Para poder optimizar un proceso es fundamental entender y conocer cada una de sus operaciones. Se debe analizar cada operación por separado e identificar cuáles son las operaciones que tienen mayor influencia en la mejora que se desea hacer. Analizar cada operación quiere decir determinar para cada una las entradas y las salidas con el propósito de conocer en dónde ocurren las mayores descargas de materiales o energía. En este proyecto el enfoque de la optimización fue dirigido a mejorar el rendimiento energético del proceso mediante la reducción del consumo de vapor. Tomando en cuenta este enfoque, el primer paso a seguir fue identificar las operaciones con mayor potencial de mejora. Primero se identificaron las operaciones que consumen vapor, estas fueron: germinación, propagación, fermentación y destilación. La operación que más consume vapor es la destilación. La destilación es una operación unitaria muy compleja y para reducir el consumo de vapor se deben considerar varios aspectos. El consumo de vapor en la destilación está relacionado con las dimensiones de la columna, con la separación que se desea hacer, con la temperatura y presión de operación, con la calidad de pureza que se desea obtener y con las características propias del vapor en la entrada a la columna.

Antes de continuar con el análisis de la destilación y de cómo surgieron las opciones para mejorar la eficiencia energética del proceso, se presenta una guía de pasos prácticos para identificar opciones de mejora en cualquier proceso en general. Hay tres preguntas que uno se puede hacer para identificar las áreas con mayor potencial de mejora:

¿Qué es lo que más se consume? Al responder esta pregunta se identifican insumos como vapor, agua, electricidad, calor, etc. Estos se usan en cantidades grandes y por lo mismo muchas veces se asume que abundan y se menosprecia su valor real. El propósito de evaluar estos aspectos es reducir su consumo.

¿Qué es lo más costoso? Al responder a esta pregunta se identifican los rubros que mayor impacto tienen en el costo de producción. Lo más costoso no es siempre algo que sea parte del producto, en algunos casos los costos más elevados están relacionados con actividades secundarias, manejo de subproductos o manejo de residuos. El propósito de identificar estos aspectos es reducir los costos de operación.

¿Qué es lo que más contamina? Al responder lo que más contamina uno identifica sustancias tóxicas, que no necesariamente se usan en grandes cantidades ni son las más costosas. Sin embargo el propósito de identificar este tipo de sustancias es reducir el impacto ambiental reduciendo su consumo o encontrando sustancias que cumplan con el mismo objetivo para el proceso y sean ambientalmente amigables.

El consumo de vapor en la fermentación y en la columna de destilación se consume en cantidades grandes y su costo es elevado debido a que el vapor se genera a partir de combustibles fósiles. El costo de la producción de vapor no está únicamente relacionado con los combustibles, sino también con el costo del tratamiento del agua para la caldera. Además de darle importancia a los costos de la generación de vapor, hay que considerar el impacto ambiental causado por la quema de combustibles fósiles y también las consecuencias del alto consumo de agua. La quema de combustibles fósiles produce gases de efecto invernadero, y el consumo de agua se debe controlar para no agotar las fuentes de este recurso.

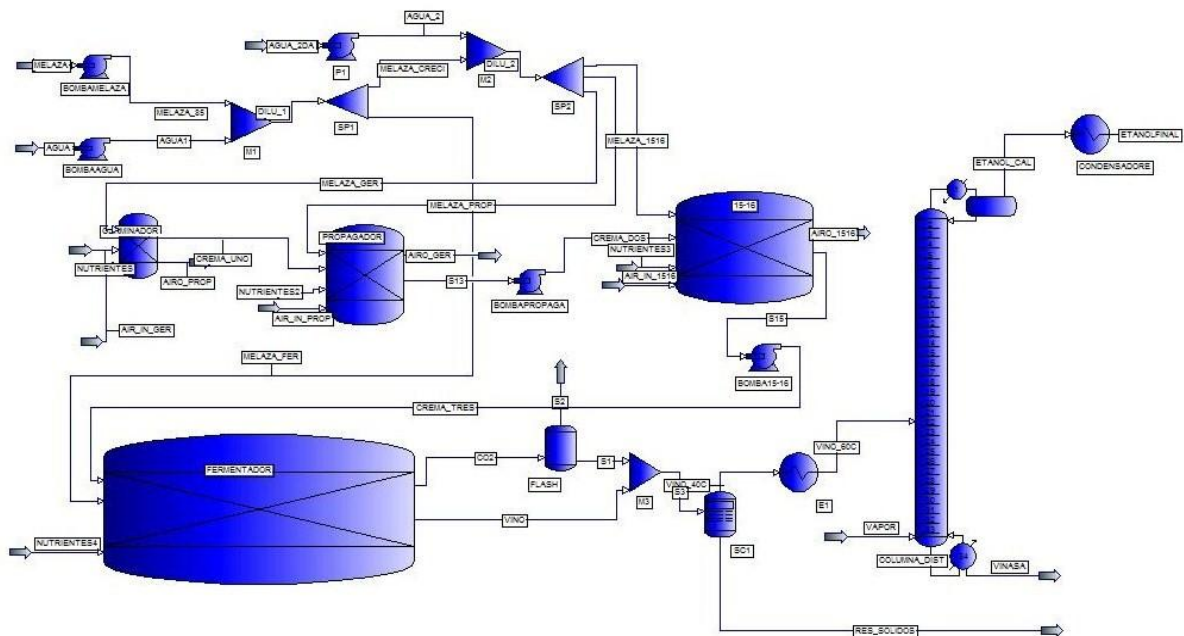
A partir de los análisis de sensibilidad realizados anteriormente (ver sección D: Análisis de Sensibilidad), se identificaron tres opciones de mejora:

1. Mantener flujo de melaza alrededor de 2,500 kg/h
2. Controlar temperatura de fermentación en 300 K (33°C)
3. Reducir la cantidad de etanol que escapa por la corriente gaseosa del fermentador

Las opciones 1 y 2 se pueden implementar con un estricto sistema de control de proceso. Para la opción 3 es necesario instalar un equipo de recuperación de etanol. La opción más sencilla puede ser colocar un “flash”, que es una operación unitaria de separación lograda por un cambio de fase que ocurre cuando el fluido sufre un cambio de presión brusco.

Tomando en cuenta las opciones mencionadas anteriormente se generó un nuevo caso base. Incorporando un flash al proceso, el diagrama de flujo sería el siguiente:

Ilustración 21. Diagrama de flujo del proceso mejorado



Los resultados de la mejora se muestran en la sección VII. Resultados, de este informe.

## VIII. RESULTADOS

Cuadro 5. Comparación de resultados

	Caso Base	Caso Mejorado
Concentración final de etanol	90 °G. L.	94 °G. L.
Flujo molar de etanol (mol/h)	12.24	12.44
Flujo molar de vapor de agua de entrada a la columna de destilación (mol/h)	95.18	88.54

Cuadro 6. Porcentajes de mejora

Porcentaje de aumento de producción de etanol	1.58%
Porcentaje de reducción de descarga de agua de la columna de destilación	41.62%
Porcentaje de reducción de consumo de vapor de agua en columna de destilación	6.97%

Cuadro 7. Reducción de emisiones

	Caso Base	Caso Mejorado
Flujo molar de agua (descarga de la columna de destilación) (mol/h)	4.38	2.55
Flujo de dióxido de carbono del fermentador (mol CO <sub>2</sub> /h)	8.28	6.31

## IX. DISCUSIÓN

El propósito de este proyecto fue el de optimizar un proceso utilizando una herramienta de simulación. Utilizar la simulación de procesos como una herramienta para evaluar y proponer proyectos de mejora de procesos es uno de los usos que mejor se le puede dar. Para que los resultados de una simulación sean confiables, la información que se utilice debe ser confiable. Solo ingresando datos correctos se pueden obtener resultados correctos. Al realizar esta simulación hubo información que no estaba disponible o que se desconocía, sin embargo los datos más importantes sí eran conocidos. Además de conocer las especificaciones de los equipos y las corrientes del proceso, es muy importante entender lo que ocurre en cada etapa del proceso. Esto es de suma importancia al utilizar el PRO II por ser un software con la capacidad de trabajar únicamente con materia en estado líquido o gaseoso. Se debe conocer el estado de la materia en cada etapa y hay que tener precaución con los materiales que están presentes como sólidos. En este proceso los componentes sólidos eran los nutrientes utilizados en la germinación, propagación y fermentación. Es por eso que se colocó un “Stream Calculator” en la corriente de salida del fermentador, para remover los sólidos presentes en esa corriente. Además del cuidadoso manejo de los componentes en estado sólido, otra consideración importante de la simulación es la unidad de tiempo. Para este proceso el tiempo de germinación, es diferente que el de propagación, fermentación y destilación de un mismo lote. Pero el paquete de software PRO II ® está diseñado para hacer cálculos de procesos continuos. Entonces es necesario ingresar los datos como flujos expresados en una misma unidad de tiempo. De esta forma se mantiene la relación de alimentación de cada componente en cada operación unitaria del proceso.

Después de tomar en cuenta todos los detalles pertinentes a la descripción del proceso, se procede a simular el caso base. Una vez realizada la simulación del caso base, se deben comparar los resultados obtenidos con los datos de la planta y verificar que sean aproximaciones cercanas. No es extraño que la primera vez que se ejecute la simulación, los resultados no concuerden con la realidad. Por eso se recomienda hacer la simulación varias veces, hasta que los resultados muestren convergencia. La importancia y la utilidad de una simulación dependen de la capacidad de representar lo que ocurre en las condiciones de operación normales de la planta. Una vez se haya verificado la veracidad de la simulación, se prosigue a plantear la opción de mejora. Antes de hacer las propuestas convenientes se realizaron varios análisis de sensibilidad, los cuáles se muestran en la sección “VI. D Análisis de Sensibilidad” de este informe.

En el primer análisis de sensibilidad realizado se definió como variable independiente el flujo de entrada de melaza al proceso. Las variables dependientes fueron el flujo molar de etanol al salir de la columna de destilación y su fracción molar de etanol. El comportamiento de estas dos variables versus el flujo de melaza se puede observar en las Ilustraciones 17 y 19. Se observa que conforme aumenta el flujo de entrada de melaza aumenta también la cantidad de etanol producido y su concentración. Sin embargo esta tendencia alcanza un valor de estabilidad, en donde el flujo de melaza puede seguir aumentando sin

afectar la cantidad y la calidad del etanol producido. Lo recomendable es operar en el punto máximo de esta curva, antes que la pendiente sea cero. A partir de este análisis, se verificó que la planta tiene el flujo de entrada de melaza óptimo para la obtención de etanol.

El segundo análisis de sensibilidad consistió en evaluar la dependencia de la concentración de etanol en las corrientes de salida del fermentador versus la temperatura de la fermentación. Se decidió hacer este análisis debido a que se sabe que el etanol es un compuesto que se evapora fácilmente, por lo tanto se debe cuidar que no se escape nada de etanol en corrientes gaseosas. La Ilustración 20 muestra el comportamiento de estas variables. Aumentar la temperatura afecta casi proporcionalmente la fracción de etanol en la salida gaseosa del fermentador, que es principalmente dióxido de carbono. La concentración de etanol en esta corriente muestra una tendencia de crecimiento, aunque no es lineal. Contrario a ésta, la concentración de etanol en la corriente de vino tiene un comportamiento parabólico. Es que al aumentar la temperatura de la fermentación, la concentración de etanol en el vino aumenta hasta alcanzar un nivel máximo, y después de ese punto, conforme aumenta la temperatura, la concentración de etanol disminuye. Con este análisis se pudo determinar que el punto con mayor rendimiento de etanol en la corriente de vino es a 300 K (33 °C). Si la temperatura aumenta mucho (más de 38°C), además que el rendimiento de etanol disminuye, también se corre el riesgo de matar a la levadura y detener totalmente la fermentación. Es por estas dos razones que controlar la temperatura en la fermentación es vital para el proceso.

A partir de los análisis de sensibilidad, se hicieron los siguientes cambios en la simulación del caso base para optimizar el proceso de destilación de etanol:

1. Fijar temperatura del fermentador: en el caso base se definió que la temperatura del fermentador sufría un cambio de 10 °C durante la reacción, debido a que es una reacción exotérmica y el control para mantener la temperatura constante es muy empírico. Los operarios vierten agua a discreción en las paredes de los fermentadores según consideren ellos sea necesario para que el fermentador no aumente mucho su temperatura e interrumpa el metabolismo de la levadura. La temperatura de fermentación óptima (300 K) se determinó utilizando la Ilustración 20. Donde se observa el efecto de la temperatura de fermentación en el producto final.

2. Recuperar etanol de la corriente de CO<sub>2</sub>: a partir de los resultados del caso base se encontró que una pequeña fracción de etanol salía por la corriente gaseosa del fermentador. Para recuperar esto, se simuló una unidad “flash” al salir del fermentador para recuperar el etanol que actualmente se pierde en la planta. Una fracción de etanol de 0.02, que a simple vista pareciera muy pequeña, pero considerando que el etanol es el producto que se desea obtener es muy importante reducir todo punto en donde se pueda perder. Además por los altos volúmenes de fabricación de la planta, la recuperación de esa pequeña fracción puede representar una mejora significativa. Los datos obtenidos a partir de esta modificación son un estimado de lo que se puede recuperar, en la planta habría que hacer una evaluación detallada para diseñar el mejor sistema de recuperación de etanol.

Como se ha mencionado anteriormente, la etapa de la destilación es crítica en este proceso. Es una etapa manejada muy cuidadosamente y monitoreada de forma meticulosa. Para la simulación, el paquete de

software PRO II ® requiere que se defina una especificación de operación de la columna. Para el caso base se estableció la especificación de operación que el reflujo en la parte superior de la columna permitiera alcanzar una concentración de etanol de 90 °G.L. Este parámetro se modificó a prueba y error hasta alcanzar el valor máximo de concentración de etanol sin cambiar ninguna otra variable de la columna (temperatura, presión, número de platos).

En resumen los cambios realizados fueron: fijar la temperatura de fermentación, recuperar etanol de la corriente gaseosa y maximizar el rendimiento de la columna de destilación. Estos cambios permitieron que la corriente de vino tuviera una mayor concentración de etanol y que la salida de etanol de la columna de destilación alcanzara 94 °G.L. Debido a que la concentración de etanol en la entrada de vino a la columna de destilación aumentó, la separación se hace con mayor facilidad, reduciendo así directamente el consumo de vapor en la columna de destilación. Estos cambios se pueden observar en los Cuadros 5 y 6 de la sección de Resultados.

Además, el Cuadro 7 muestra otros beneficios obtenidos a partir de estas mejoras. La cantidad de agua residual descartada de la columna de destilación y la cantidad de dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) emitido en la fermentación disminuyeron considerablemente. La reducción en la emisión de CO<sub>2</sub> se debe al control de la temperatura del fermentador y la reducción de la descarga de agua se debe a que la columna de destilación utiliza menos vapor y a que el vino tiene menos contenido de agua.

## X. CONCLUSIONES

- Una opción para optimizar el proceso de destilación de etanol es la recuperación del etanol que se pierde en la corriente gaseosa de la fermentación, la cual fue identificada por la simulación del proceso de fermentación usando el paquete de software PRO II ®.
- Otra opción, identificada por la simulación realizada usando el paquete de software PRO II®, para optimizar el proceso de destilación de etanol es mantener la temperatura de fermentación en 33 °C.

La implementación de las opciones mencionadas anteriormente provoca las siguientes mejoras en el proceso:

- La producción de etanol aumenta en 11.00 L/h, equivalente a un aumento de 1.58%.
- La concentración de etanol aumenta de 90 a 94 °G.L.
- El consumo de vapor de agua en la columna de destilación disminuye en 119.53 kg/h, que representa una reducción de consumo de vapor de 6.97%.

## XI. RECOMENDACIONES

La simulación de procesos es un proceso de mejora continua. Es una herramienta que se debería usar continuamente para evaluar la operación de los procesos. Las opciones de mejora encontradas en este proyecto surgieron con el propósito de mejorar el rendimiento energético del proceso. Con el mismo enfoque seguramente se pueden encontrar otras opciones de mejora y se podrían encontrar aún más cambiando el enfoque del análisis.

Para mejorar el desempeño del proceso se recomienda hacer simulaciones con diferentes enfoques, tales como:

1. Reducir consumo de agua
2. Reducir la descarga de desechos líquidos
3. Aprovechamiento de los subproductos
4. Reducir pérdidas de calor
5. Con los datos de la empresa, hacer análisis económico de los beneficios obtenidos si se implementan las opciones identificadas por la simulación realizada con el paquete de software PRO II ®.
6. Reducir el impacto ambiental causado por las descargas líquidas y las emisiones atmosféricas de la planta.
7. Aprovechar calor del fermentador.

## XII. BIBLIOGRAFÍA

1. Comisión Nacional del Medio Ambiente, 1998. *Guía para el Control y Prevención de la Contaminación Industrial. Fabricación de Levaduras*. Santiago, Chile.
2. Fermeglia, Maurizio. 2007. *Process simulation fundamentals and techniques*. ICS UNIDO Area Science Park Trieste.
3. Fermeglia, Maurizio. 2007. *Process simulation reporting methodology*. ICS UNIDO Area Science Park Trieste.
4. Ghanadzadeh, H., Haghi, A. 2005. *Study of Vapor-liquid phase equilibria of systems of n-butanol / n-octanol and terc-butanol/ n-octanol. Experimental and UNIQUAC and NTRL models*. Gilan University, Rasht, Iran.
5. González, L. 2006. *Análisis Económico de Precios del Bioetanol para Mezclas con Gasolinas*. Naciones Unidas Comisión Económica para América Latina y el Caribe (CEPAL).
6. Lavarack, B., Broadfoot, R. 2003. *Estimates of Ethanol Production from Sugar Cane Feedstocks*. Sugar Research Institute Australia.
7. López, F. 2006. *Ethanol production from molasses*. ICIDCA, Cuba.
8. Normativa MERCOSUR Resolución No. 77/94: Definiciones Relativas a Bebidas Alcohólicas.
9. Nuñez, A., Ortiz, J. 2005. *Aplicación de los métodos de contribución de grupos a la predicción del equilibrio de fases del sistema acetato de etilo - ciclohexano*. Universidad Nacional de Ingeniería, Perú.
10. Osorio, W., Osorio, O. 2007. *Sobre la Termodinámica de Soluciones Electrolíticas*. Revista Facultad de Ingeniería Universidad Nacional de Colombia sede Manizales. No 40 pp 7-21.
11. Smith, Van Ness, Abbott. 2003. *Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química*. Sexta edición. McGraw-Hill.

## XIII. APÉNDICE

### A. Guía de inicio rápido para el PRO II®

A continuación se describen 7 pasos esenciales para realizar una simulación en PRO II ®. Estos pasos son generales para guiar al usuario en un inicio rápido del programa.

1. **Dibujar diagrama de flujo.** Seleccionar las operaciones unitarias de la barra de de unidades de proceso del PRO II. Seleccionar la unidad con el ratón una vez, y arrastrarla al área de trabajo, presionar una vez más el ratón para fijar el ícono en el diagrama. Para colocar las corrientes, seleccionar el botón de corrientes (streams) y después usar el cursor para unir las corrientes a las entradas o salidas de las operaciones unitarias.

2. **Definir componentes.** Seleccionar el botón de componentes para tener acceso a toda la lista de componentes del proceso. Elegir de los más de 1,700 componentes en la base de datos incluida haciendo una búsqueda rápida por el nombre del componente.

3. **Seleccionar método termodinámico.** Seleccionar el botón de diagrama de fase para elegir el método termodinámico de la lista de métodos comúnmente usados, correlaciones generales, métodos de ecuación de estado, métodos de actividad líquida y paquetes especiales.

4. **Definir corrientes de alimentación.** Seleccionar con una doble pulsación del ratón cada corriente para suministrar la información de cada corriente (flujo, composición, presión y temperatura).

5. **Definir operaciones unitarias.** Seleccionar con una doble pulsación del ratón cada ícono de las operaciones unitarias en el diagrama de flujo e ingresar la información requerida (campos marcados en rojo). Conforme el usuario ingrese los datos, los campos de datos cambiarán de color rojo a azul.

6. **Ejecutar simulación.** Una vez toda la información ha sido ingresada y ningún ícono o corriente aparece marcada en rojo, puede pulsar el botón ejecutar para resolver el proceso. Se recomienda ejecutar la simulación varias veces para que los resultados obtenidos sean el resultado de varias iteraciones, lo que garantiza la convergencia de éstos.

7. **Revisar resultados.** Después que el diagrama ha sido resuelto se pueden revisar los datos tabulados, graficados o en un reporte de Microsoft Excel ® que genera el software.

### B. Elección del método termodinámico

Los modelos termodinámicos para los sistemas de equilibrio líquido vapor (ELV) analizan el comportamiento molecular de la solución frecuentemente por medio del concepto de *composición local*. Dentro de una solución líquida, las composiciones locales son diferentes a la composición general de la mezcla. La composición local considera arreglos de corto alcance y sus orientaciones moleculares según el tamaño de las moléculas y las fuerzas intermoleculares. Los modelos más utilizados en este tipo de

sistemas son el NRTL (Non Random Two Liquid) de Renon y Prausnitz y la ecuación UNIQUAC (Universal Quasi-Chemical) de Abrams y Prausnitz. También se utilizan la ecuación de Wilson, las de Margules y van Laar en la mayoría de casos para sistemas binarios, aunque la ecuación de Wilson sí es adaptable para sistemas multicomponentes. (Smith, 2003)

Aunque han aparecido muchas ecuaciones empíricas, su comprensión teórica no ha sido clara. Los modelos teóricos (mencionados en el párrafo anterior) consideran interacciones fundamentales más realistas entre los componentes e incorporan los últimos conceptos desarrollados de la simulación molecular. (Osorio, 2007)

Para hacer los cálculos termodinámicos, el software de simulación PRO II pone a la disposición del usuario estos y otro métodos termodinámicos. La operación unitaria más influyente en esta simulación para determinar el método termodinámico a utilizar fue la destilación. En ésta los principales componentes son agua y etanol, sin embargo hay otros alcoholes y otras sustancias (cogenericos) que aparecen en menores concentraciones, por lo que asumir un sistema binario no daría resultados cercanos a la realidad. Cada modelo termodinámico utiliza parámetros específicos para la realización de los cálculos. El PRO II tiene una base de datos de parámetros para cada método. No se pudo utilizar la ecuación de UNIQUAC porque algunos parámetros no estaban disponibles y no fue posible encontrarlos en otras fuentes bibliográficas. Esto se debe a que esta ecuación se basa en las propiedades de los grupos funcionales de las moléculas, y en la torre de destilación hay una gran variedad de componentes provenientes del vino de los cuales no se conoce con precisión su estructura molecular. Para hacer la simulación lo más cercana a la realidad, se descartaron la ecuación de Margules y van Laar, por no poderse adaptar a sistemas multicomponentes. Esto nos deja la elección entre Wilson y NRTL. La ecuación de Wilson requiere únicamente 2 parámetros, y el modelo NRTL requiere 3 parámetros. Basándose en la cantidad de parámetros que utilizan, los resultados obtenidos por el método NRTL son más confiables que los obtenidos por el método de Wilson.

Los métodos que se han discutido anteriormente han sido utilizados durante muchos años y se siguen utilizando por ser confiables a nivel de ingeniería. Además de las razones expuestas anteriormente, la razón por la que se eligió el modelo de NRTL es porque este ofrece la mejor correlación en la presencia de un azeótropo. (Núñez, 2005)

Cuadro 8. Características de métodos termodinámicos

<b>Método / Característica</b>	<b>NRTL</b>	<b>UNIQUAC</b>	<b>Wilson</b>	<b>Margules</b>	<b>Van Laar</b>
Sistemas binarios	•	•	•	•	•
Sistemas multicomponentes	•	•	•		
Número de parámetros	3	Según componentes del sistema	2	2	2
Presente en PRO II	•	•	•	•	•
Útil para azeótropo	•	•			