

**Universidad de Concepción**  
**Facultad de Ingeniería**  
**Departamento de Ingeniería Química**

**Profesores Patrocinantes**  
Andrés Mejía Matallana  
José Matías Garrido



**Deshidratación de Alcoholes Mediante  
Destilación Heteroazeotrópica**

**Carlos Ignacio Jara Valenzuela**

Informe de Memoria de Título  
para optar al Título de

**Ingeniero Civil Químico**

**Agosto 2019**

# Sumario

El sector del transporte es uno de los mayores participantes del calentamiento global y sus emisiones continuarán aumentando en las próximas décadas. Luego, los biocombustibles son considerados por la gran mayoría como la solución a mediano plazo para los combustibles fósiles. Los biocombustibles se generan a partir de procesos de fermentación de biomasa, en el que el producto obtenido se encuentra diluido en agua. Este último compuesto debe ser removido en la máxima cantidad posible para no disminuir la eficiencia de la combustión en los motores, entre otras cosas. Comúnmente, esto se logra mediante la destilación heteroazeotrópica. Dado que los procesos de separación tienen una gran relevancia en los diseños conceptuales de ingeniería, el objetivo de este trabajo es realizar el diseño conceptual de la destilación heteroazeotrópica utilizando el simulador Aspen Plus junto con la revisión de los conceptos termodinámicos involucrados.

Para lo anterior, se parte por evaluar las herramientas y capacidades del software para el cálculo del equilibrio de fases tanto para sistemas binarios como ternarios. Luego, se escogen los modelos termodinámicos de acuerdo a la naturaleza de los sistemas de estudio para después realizar la optimización de los parámetros binarios de los coeficientes de actividad, utilizando datos experimentales que permitirán modelar el equilibrio de la forma más precisa posible. Después, se definen las bases de diseño para simular, optimizar y evaluar económicamente el proceso de destilación.

Los casos de estudio corresponden a los sistemas ternarios etanol + agua + benceno, etanol + agua + MTBE, etanol + agua + isooctano y el sistema binario n-butanol + agua. Luego, se concluye que el simulador posee una gran variedad de herramientas para realizar el cálculo del equilibrio de fases tanto para sistemas binarios o multicomponente, en el cual entre ellas existe un tradeoff entre flexibilidad y dificultad. El método  $\gamma - \phi$  (UNIQUAC-HOC) fue el escogido dado que la presión es baja y a la presencia de una alta no-idealidad de las mezclas.

A grandes rasgos, se puede decir que la modelación de los sistemas binarios es suficientemente buena pero para los sistemas ternarios el simulador no ofrece un gran soporte para estas operaciones un poco más exigentes.

Las simulaciones y la optimización del sistema con benceno arrojaron resultados en la mayoría satisfactorios al considerar las bases de diseño. Sin embargo, estos procesos fueron muy tediosos y consumieron una gran cantidad de tiempo, en donde hay que considerar que en el mercado existen otros simuladores que no poseen estos inconvenientes. Para el sistema con MTBE, se concluye que puede tener un menor costo anualizado con respecto al sistema con benceno, ya que el calor consumido se reduce dado al aumento de la repulsión de los componentes. En principio, para el sistema binario de n-butanol + agua no se necesita agregar un entrainer para llevar a cabo la separación. Por último, utilizando el sistema etanol + agua + isooctano permitió comparar los resultados de una misma simulación utilizando otro software comercial, en el cual se concluye que los cálculos del equilibrio fueron similares, no así los resultados de la simulación del proceso.